



Simulation numérique de suspensions frictionnelles. Application aux propergols solides

Stany Gallier

► To cite this version:

Stany Gallier. Simulation numérique de suspensions frictionnelles. Application aux propergols solides. Autre [cond-mat.other]. Université Nice Sophia Antipolis, 2014. Français. NNT : 2014NICE4073 . tel-01127088

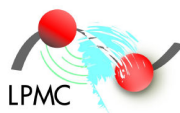
HAL Id: tel-01127088

<https://theses.hal.science/tel-01127088>

Submitted on 6 Mar 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



UNIVERSITÉ DE NICE-SOPHIA ANTIPOLIS - UFR SCIENCES
École Doctorale de Sciences Fondamentales et Appliquées

Laboratoire de Physique de la Matière Condensée LPMC CNRS UMR 7336

THÈSE

pour obtenir le titre de

DOCTEUR EN SCIENCES

Spécialité : PHYSIQUE

présentée par

Stany GALLIER

**SIMULATION NUMÉRIQUE DE SUSPENSIONS FRICTIONNELLES
APPLICATION AUX PROPERGOLS SOLIDES**

Thèse dirigée par Elisabeth LEMAIRE

soutenue le 14 octobre 2014

Jury :

Elisabeth GUAZZELLI
Eric CLIMENT

Rapporteur
Rapporteur

Jean-François GUERY
Elisabeth LEMAIRE
Anaël LEMAÎTRE
Daniel LHUILLIER
Laurent LOBRY
François PETERS

Membre invité
Directrice de thèse
Examinateur
Examinateur
Examinateur
Examinateur

RÉSUMÉ

Ce travail se consacre à la simulation numérique tridimensionnelle de suspensions denses, monodisperses, non-inertiels et non-colloïdales. Nous avons pour ce faire développé une méthode numérique basée sur une approche de type domaine fictif. Le modèle inclut également une modélisation détaillée des forces de lubrification ainsi que des forces de contact avec prise en compte des rugosités et du frottement. Un résultat majeur est le rôle important du frottement entre particules sur la rhéologie de la suspension – en particulier sur la viscosité de cisaillement et les contraintes normales – mais aussi sur la viscosité normale ou la diffusion des particules. Le frottement contribue à augmenter fortement la contrainte de contact alors que la contrainte hydrodynamique n'est quasiment pas affectée. Cette contrainte de contact s'avère être la contrainte majoritaire dans les suspensions denses. La prise en compte du frottement dans les simulations permet de se rapprocher notablement des résultats expérimentaux. Le rôle du confinement est également étudié et les parois s'avèrent conduire à une organisation locale marquée de type hexagonal ainsi qu'à un glissement. Cette organisation entraîne des effets sensibles sur les propriétés rhéologiques surtout pour la première différence de contraintes normales N_1 qui peut localement devenir positive. Enfin, nous abordons l'impact d'amas percolants de particules dans la suspension. La fraction volumique de percolation se situe entre 0,3 et 0,4 avec un effet marqué de la rugosité, du frottement et de la taille du domaine. Les caractéristiques de ces amas percolants sont en partie compatibles avec une théorie de la percolation isotrope avec toutefois quelques désaccords sur certains exposants critiques. Par contre, les amas percolants n'ont qu'un effet marginal sur la rhéologie de la suspension.

MOTS-CLÉS

SUSPENSIONS – FROTTEMENT – RHÉOLOGIE – PERCOLATION – LUBRIFICATION – DOMAINE FICTIF – PROPERGOLS SOLIDES

ABSTRACT

This work is devoted to three-dimensional numerical simulations of monodisperse non-inertial non-colloidal concentrated suspensions. To this end, a numerical method based on a fictitious domain technique is developed. It includes a detailed lubrication model as well as a contact model allowing for particle roughness and friction. One major result is the strong effect of friction on rheology, especially on shear viscosity and normal stresses. It also alters markedly normal viscosity or particle diffusion. Friction acts mostly through an increase in the contact stress since the hydrodynamic stress remains unaffected. This contact stress occurs to be the prevailing stress in dense suspensions. Overall, frictional results are in much better agreement with available experiments. The role of confinement is investigated as well and walls are shown to induce a strong local hexagonal ordering with a significant wall slip. This wall-induced ordering has a notable effect on rheology, especially on the first normal stress difference N_1 that can be locally positive. Finally, we have studied the percolation of particle clusters across the suspension. The critical volume fraction is found to be in the range 0.3~0.4, with a significant dependence on roughness, friction, and domain size. Percolating clusters characteristics can globally be described by an isotropic percolation theory, with discrepancies regarding some critical exponents however. The role of percolating clusters on rheology is found to be very limited.

KEYWORDS

SUSPENSIONS – FRICTION – RHEOLOGY – PERCOLATION – LUBRICATION – FICTITIOUS DOMAIN – SOLID PROPELLANTS

REMERCIEMENTS

Ce travail de thèse n'aurait pas pu se faire sans un certain nombre de personnes que je souhaitais vivement remercier :

– **au Centre de Recherches du Bouchet (CRB) :**

Jean-François GUERY, pour avoir fait germer l'idée de cette thèse et m'avoir soutenu dans ces travaux. Hervé GRAINDORGE et Franck GODFROY, pour m'avoir autorisé à réaliser cette thèse en parallèle de mes activités professionnelles. Mathieu PLAUD, pour son aide en algorithmes en tous genres.

– **au Laboratoire de Physique de la Matière Condensée (LPMC) :**

Elisabeth LEMAIRE, pour avoir accepté d'encadrer cette thèse un peu spéciale et pour son enthousiasme continu. Laurent LOBRY et François PETERS pour les nombreuses discussions techniques qui ont permis d'enrichir largement ce travail.

TABLE DES MATIÈRES

Table des matières	8
1 Introduction générale	11
I Généralités	15
2 Propergols et propulsion solide	17
2.1 Propulsion solide	17
2.2 Propergols solides : nature et fabrication	20
3 Eléments de rhéologie	25
3.1 Notions de rhéologie des fluides complexes	26
3.2 Rhéophysique des suspensions	31
3.3 Rhéologie des propergols	42
4 Rôle et impact de la microstructure	45
4.1 Microstructure : généralités	45
4.2 Microstructure des suspensions	48
4.3 Relation microstructure-propriétés dans les propergols	54
II Approche numérique pour la simulation des suspensions	59
5 Méthodes numériques	61
5.1 Etude bibliographique	61
5.2 Critères de choix et approche retenue	71
6 Description du modèle numérique	73
6.1 Formulation mathématique	73
6.2 Formulation numérique	76
6.3 Suivi et déplacement des particules	82
6.4 Conditions limites	87
6.5 Forces de lubrification	88
6.6 Forces de contact	99
6.7 Le code MrProp	105
7 Validations académiques	109
7.1 Sphère en écoulement cisailé	109
7.2 Sphère au voisinage d'une paroi	112
7.3 Deux sphères lisses en cisaillement	114
7.4 Trois sphères lisses en cisaillement	118
7.5 Viscosité à fréquence infinie	120
7.6 Deux sphères rugueuses en cisaillement	121
7.7 Sphère rugueuse sur plan incliné	124
7.8 Sédimentation de 10648 particules	125

7.9	Migration inertielle	126
III	Simulations numériques des suspensions	129
8	Généralités sur les simulations	131
8.1	Objectif général	131
8.2	Etudes paramétriques préliminaires	135
9	Sur le rôle du frottement dans les suspensions	145
9.1	Objectifs	145
9.2	Viscosité	146
9.3	Différences de contraintes normales	147
9.4	Contraintes normales	151
9.5	Microstructure	151
9.6	Coefficient de frottement	153
9.7	Lien vers les modèles continus	154
9.8	Rhéologie globale	157
9.9	Diffusion	162
9.10	Ecoulement	168
10	Rôle du confinement dans les suspensions	173
10.1	Objectifs	173
10.2	Structuration	174
10.3	Fraction volumique	175
10.4	Vitesse	178
10.5	Viscosité	180
10.6	Différences de contraintes normales	183
10.7	Lien avec les mesures	187
11	Percolation d'amas dans les suspensions	189
11.1	Objectifs	189
11.2	Taille des amas	190
11.3	Percolation d'amas	193
11.4	Seuil de percolation	194
11.5	Quelques caractéristiques des amas percolants	196
11.6	Lois d'échelle et exposants critiques	200
11.7	Accord avec la théorie de De Gennes	203
11.8	Lien avec la rhéologie	204
12	Quelques perspectives de simulation	209
12.1	Améliorations du modèle	209
12.2	Modèles continus	210
12.3	Simulation couplée écoulement-combustion	211
12.4	Transferts de chaleur dans les suspensions	212
13	Synthèse et conclusion	213
A	Le coin du numéricien	217
A.1	Schémas d'intégration temporelle	217
A.2	Schéma semi-lagrangien	218
A.3	Gradient conjugué et préconditionnement	219

B Fonctions de résistance	221
Bibliographie	225

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Contexte industriel

La figure suivante représente une illustration emblématique de l'utilisation de propergols solides : Ariane 5. Ses deux propulseurs latéraux, chargés chacun de près de 250 tonnes de propergol solide, assurent la quasi-totalité de la poussée du lanceur pendant sa traversée de l'atmosphère. Du propergol solide ? Un solide à l'aspect caoutchouteux qui brûle en libérant une grande quantité de gaz chauds.



Fig. 1.1 – Une Ariane 5 au décollage. Chaque propulseur latéral est chargé de propergol solide.

Au début de son cycle de fabrication, ce propergol solide est sous la forme d'une **suspension concentrée**, à savoir une quantité importante (supérieure à 70 % en volume) de fines particules (les charges énergétiques) noyées dans un polymère liquide. Cette pâte est malaxée puis transportée pour être coulée dans le propulseur. Ce n'est qu'après une réticulation à chaud que ce propergol prend sa forme solide définitive.

Pendant toute sa phase de mise en œuvre, cette suspension de propergol subit un certain nombre de sollicitations qui vont modifier sa **microstructure**, c'est-à-dire l'agencement spatial des particules constituant cette suspension. De nombreux travaux, expérimentaux et numériques, ont en effet clairement démontré que lorsqu'une suspension concentrée est sollicitée, par exemple par un simple cisaillement, les particules s'organisent en des structures qui ne sont plus aléatoires et homogènes mais qui peuvent montrer soit certaines organisations (comme par exemple une orientation des contacts selon des directions privilégiées), soit des inhomogénéités avec des surconcentrations de

particules dans certaines régions de l'écoulement. Lors de la réticulation du propergol – c'est-à-dire lorsqu'il devient solide – celui-ci va conserver la mémoire de cet état et figer ainsi définitivement cette microstructure.

Cette microstructure joue toutefois un rôle important dans les propriétés macroscopiques finales du propergol. Sa vitesse de combustion, ses propriétés mécaniques ou encore électriques vont être très fortement modifiées par cette configuration spatiale des particules. Il est surprenant de constater qu'un propulseur d'Ariane 5, d'environ 30 mètres de haut, puisse avoir des propriétés sensiblement altérées par une structure différente à une échelle submillimétrique. C'est pourtant le cas. Ainsi, les modifications induites sur la vitesse de combustion d'un moteur et imputables à la microstructure des particules dans le propergol peuvent atteindre de l'ordre de 5 %, une valeur suffisamment importante pour que le processus à l'origine de cette variabilité soit mieux compris et maîtrisé.

Problématique abordée

D'un point de vue industriel, il convient de pouvoir minimiser et contrôler les effets du procédé de fabrication des propergols afin d'obtenir un matériau de propriétés finales connues et reproductibles. La question générale qui se pose consiste alors à **comprendre** et **prédire** comment la sollicitation – liée au procédé de fabrication – qui est vue par la suspension de propergol modifie les propriétés macroscopiques fonctionnelles du propergol final. Dit autrement : quel est le lien entre procédé de fabrication, microstructure et propriétés finales ? C'est, en l'état actuel des connaissances, une entreprise de longue haleine que nous n'avons pas la prétention d'aborder dans sa totalité à travers cette étude. Nous focaliserons notre travail sur le lien entre la sollicitation de la suspension (son écoulement) et la microstructure obtenue. Ceci nécessitera en particulier de s'intéresser à la physique complexe des suspensions concentrées et nous tenterons de contribuer à une meilleure connaissance de la rhéologie de ces milieux.

Travaux effectués

Etudier finement la rhéophysique et la microstructure des suspensions concentrées peut se faire expérimentalement ou numériquement. Nous avons choisi la seconde option ici. Une partie importante du travail a consisté à développer *ab initio* une méthode numérique adaptée à la problématique et suffisamment générale pour pouvoir être utilisée dans une large gamme de configurations. Le choix s'est porté sur une méthode de simulation directe par une approche de domaine fictif. Un des points importants sera également d'intégrer dans cet outil la physique pertinente pour les écoulements traités, ici les forces de lubrification et les forces de collision. Dans l'optique de disposer d'un outil **prédictif**, un soin particulier sera apporté à la modélisation de ces deux forces ainsi qu'à la validation du code.

Par la suite, les travaux consisteront à exploiter ce code de calcul via des simulations ayant pour objectif de comprendre et prédire la rhéologie et la microstructure des suspensions. Les configurations traitées resteront volontairement académiques avec des suspensions monodisperses en cisaillement simple. Les résultats principaux aborderont le rôle du frottement des particules, du confinement et de la percolation des amas. Nous espérons ainsi contribuer à une meilleure connaissance de la physique de ces milieux complexes.

Plan du manuscrit

Ce document se scinde en trois parties distinctes : les généralités, les aspects de développement numérique et les résultats de physique des suspensions. Ces parties sont relativement indépendantes : le lecteur physicien impatient pourra directement se rendre à la troisième partie tandis que

l'amateur de modélisation numérique se concentrera sur la deuxième.

La première partie du manuscrit aborde un certain nombre de généralités et rappelle quelques éléments de propulsion solide. Ce type de propulsion pour fusée et missile représente en effet l'essentiel de l'utilisation des propergols solides. Quelques détails sur leur nature ainsi que des éléments relatifs à leur fabrication seront fournis. L'on aborde ensuite des rappels généraux de rhéophysique des suspensions qui mettent en lumière la complexité des phénomènes sous-jacents et ce, même pour des suspensions très simples. Nous terminons cette partie en focalisant sur la microstructure des suspensions, en passant en revue les travaux académiques sur le sujet, avant de terminer en fournissant quelques résultats sur l'effet important de la microstructure sur les propriétés des propergols.

La deuxième partie détaille les aspects de modélisation et de développement numérique. Après une analyse bibliographique permettant d'orienter un choix de méthode, nous développons la description théorique et numérique de l'approche choisie, en l'occurrence une technique de domaine fictif. La modélisation des deux ingrédients supplémentaires – et importants – que sont les interactions de lubrification et de collision sera également abordée en détail. Cette partie se termine par une importante phase de validation de complexité croissante et principalement dédiée à des configurations d'intérêt de type écoulement de Stokes.

La troisième partie du manuscrit aborde enfin les résultats obtenus en physique des suspensions. Trois aspects ont été particulièrement étudiés. Le premier concerne le rôle du frottement des particules avec la mise en évidence d'effets notables sur l'écoulement de la suspension. Le deuxième considère l'effet du confinement sur la rhéologie des suspensions et tente de mieux cerner le rôle des parois. Enfin, le troisième thème traite de la présence d'amas dans les suspensions, et principalement les amas percolants, afin d'étudier leurs conditions d'apparition et de mettre en évidence un éventuel lien avec la rhéologie.

PREMIÈRE PARTIE

Généralités

PROPERGOLS ET PROPULSION SOLIDE

Sommaire

2.1	Propulsion solide	17
2.1.1	Principe de la propulsion	17
2.1.2	Propulseur à propergol solide	18
2.1.3	L'exemple d'Ariane 5	19
2.2	Propergols solides : nature et fabrication	20
2.2.1	Nature des propergols solides	20
2.2.2	Combustion des propergols solides	21
2.2.3	Fabrication des propergols	22

2.1 Propulsion solide

2.1.1 Principe de la propulsion

Avant de définir ce qu'est exactement un propergol solide, peut-être est-il plus judicieux dans un premier temps de préciser à quoi il sert. L'utilisation historique – et principale – de ces propergols consiste avant tout à *propulser* un objet, le plus souvent un missile ou une fusée. Accessoirement, le propergol est également employé dans des domaines insoupçonnés comme le gonflement des airbags de voiture par exemple.

Même si les premières fusées à usage militaire sont attestées en Chine dès le XIII^e siècle, la propulsion pour fusée n'est théorisée qu'au début du siècle précédent par le père de l'astronautique moderne, le russe Tsiolkovski. En 1903, il formalise la possibilité de se déplacer dans le vide en utilisant le principe de la réaction pour sa fusée (Fig. 2.1).



Fig. 2.1 – Fusée de Tsiolkovski (1903).

Ce principe d'action-réaction consiste à produire une quantité importante de gaz qui, détendus dans une tuyère, sont accélérés et éjectés à grande vitesse dans une direction donnée afin de déplacer, par réaction, la fusée dans la direction opposée. Ce principe est toujours à l'œuvre dans les fusées

actuelles.

La force de poussée F induite par l'éjection des gaz est donnée par la relation :

$$F = \dot{m} C_F c^* \quad (2.1)$$

où \dot{m} est le débit de gaz sortant de la tuyère, C_F un coefficient (dit de poussée) fonction des conditions de détente dans la tuyère et c^* est la vitesse caractéristique, une grandeur qui est liée aux gaz produits. En particulier, $c^* \propto \sqrt{T_{comb}}$ où T_{comb} est la température de combustion des gaz générés. Ces relations ont l'avantage d'explicitier clairement ce que l'on attend d'un propergol : être capable de générer un débit \dot{m} important de gaz à température T_{comb} élevée afin de maximiser la poussée.

Les différents types de propulsion existants diffèrent au final dans la manière de générer et d'accélérer ces gaz. Dans le cas de la propulsion dite liquide, ils sont obtenus par des réactions chimiques entre carburants et comburants liquides, souvent l'oxygène et l'hydrogène liquides. Pour la propulsion dite solide, carburant et comburant sont intégrés au sein d'un même constituant pour former un solide métastable dont la combustion générera les gaz voulus : le propergol solide. Le choix entre ces deux types très répandus de propulsion répond à différents impératifs techniques et le choix de la propulsion solide est généralement dicté par son plus faible coût, sa grande fiabilité et sa facilité de mise en œuvre (Guery *et al.*, 2010).

2.1.2 Propulseur à propergol solide

Le schéma de la Fig. 2.2 représente un moteur à propergol solide. Il est composé des principaux éléments suivants :

- **la structure** : c'est l'enveloppe externe du moteur. Elle est constituée le plus souvent d'une virole réalisée en métal ou en matériaux composites.
- **le chargement** : en rouge sur la figure, il s'agit du bloc de propergol solide qui va brûler en produisant des gaz chauds.
- **l'allumeur** : ce dispositif pyrotechnique génère lui aussi des gaz chauds qui vont initier la combustion du chargement de propergol.
- **les protections thermiques** : en matériau réfractaire, elles ont pour rôle de protéger la structure des températures élevées régnant dans la chambre de combustion (jusqu'à près de 4000 K).
- **la tuyère** : en détendant les gaz chauds produits par le propergol, elle permet de les accélérer à une vitesse supersonique. C'est par elle qu'est générée la poussée et, mobile, elle permet également d'orienter cette poussée.

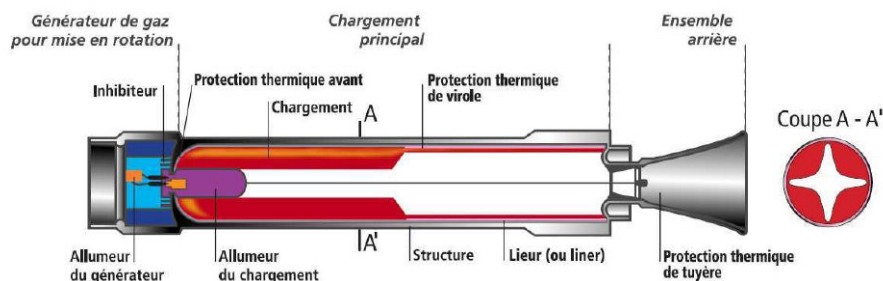


Fig. 2.2 – Exemple de moteur à propergol solide (Tauzia, 2003).

La forme du chargement de propergol revêt un rôle particulier et peut prendre différents motifs. En Figure 2.2, il dessine une étoile à quatre branches (*cf.* coupe A-A'). Dans d'autres cas, le chargement peut juste être tubulaire ou, au contraire, de forme particulièrement complexe. La raison tient au fait

que la quantité de gaz générée par la combustion du propergol est proportionnelle à la surface du chargement. Une grande surface en combustion offrira alors naturellement un débit gazeux plus important. Au fur et à mesure que le propergol se consume, cette surface évolue. Le motif initial gouverne alors l'évolution complète de la surface et, par conséquent, celle du débit de gaz généré et de la poussée.

2.1.3 L'exemple d'Ariane 5

L'exemple le plus emblématique de l'utilisation de propergols solides reste probablement celui d'Ariane 5. Ce lanceur utilise en effet la propulsion solide mais également la propulsion liquide. Il est composé de deux étages propulsifs (Fig. 2.3) utilisés chacun dans une phase de vol particulière. Le corps central est dédié à la propulsion liquide : il s'agit de l'étage principal cryogénique (EPC) principalement constitué d'un réservoir d'hydrogène liquide et d'un autre d'oxygène liquide refroidis à $-250\text{ }^{\circ}\text{C}$. Situés de part et d'autre du corps central, Ariane 5 fait également appel à ses deux moteurs à propergol solide (parfois appelés EAP pour étage d'accélération à poudre¹).

Chacun de ces deux moteurs, d'une hauteur de 31 mètres et d'un diamètre de 3 mètres, est chargé de près de 250 tonnes de propergol solide. Ils délivrent une poussée combinée de 1200 tonnes au décollage, soit 92 % de la poussée totale du lanceur dans cette phase. Leur durée totale de fonctionnement, jusqu'à épuisement du propergol, est d'environ 130 secondes, avant leur largage à 60 kilomètres d'altitude, au-dessus de l'océan. Le lanceur a alors atteint la vitesse d'environ 2 km/s.

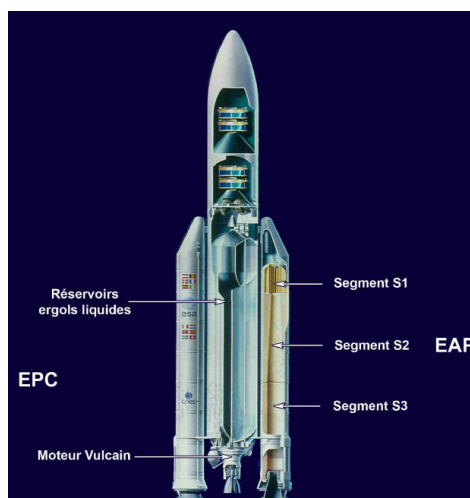


Fig. 2.3 – Architecture du lanceur Ariane 5 (Chaminade, 2006).

Les moteurs à propergol solide du lanceur Ariane 5 sont dits segmentés car constitués de trois blocs (segments) : le segment S1, en forme d'étoile à 15 branches, et les segments S2 et S3, de forme cylindro-conique. Ces géométries permettent de répondre aux spécificités demandées par la mission. En particulier, la forme étoilée du segment S1 offre une surface en combustion importante pour assurer une grande poussée au décollage. La pression régnant dans le propulseur est de l'ordre de 50 bars.

1. Bien que très répandue, cette terminologie est inexacte et à proscrire dans la mesure où le propergol solide – comme nous allons le voir – n'a aucunement la consistance d'une poudre.

2.2 Propergols solides : nature et fabrication

2.2.1 Nature des propergols solides

Littéralement "ergol pour la propulsion", le propergol solide est un corps dont la réaction chimique, sans intervention de l'oxygène de l'air, libère une grande quantité d'énergie et un fort volume de gaz chauds. Ces propergols intègrent des composés dont l'enthalpie de formation est aussi élevée que possible et capables de restituer à la demande l'énergie chimique qui y est emmagasinée.

Historiquement, la poudre noire (un mélange de salpêtre, de soufre et de charbon de bois) peut être vue comme le premier propergol solide. Il est admis que ce sont les Chinois qui inventèrent la poudre noire au IX^e siècle pour des fusées d'artifice avant d'être introduite en Europe au Moyen-Âge². Dans le courant du XIX^e siècle, l'essor de la chimie conduit à la création de nouvelles substances comme la nitrocellulose. C'est d'ailleurs avec ce composé (appelé alors fulmicoton) que Jules Verne envisageait de propulser ses passagers dans son roman *"De la Terre à la Lune"*. Les premiers véritables propergols solides pour moteur-fusée, à l'époque de la seconde guerre mondiale, étaient d'ailleurs toujours constitués de nitrocellulose ainsi que de nitroglycérine (propergols dits double-base). Ces propergols sont qualifiés d'**homogènes** et intègrent, au sein de leur structure même, les éléments oxydants et réducteurs. Bien que toujours utilisés pour certaines applications (comme les poudres à canon), ils ont progressivement laissé leur place aux propergols dits **composites** pour des raisons de performance et de facilité de mise en œuvre. Ces derniers sont hétérogènes car l'oxydant est physiquement séparé du réducteur comme dans le cas de la poudre noire. Ils sont constitués d'une matrice polymérique (liant), généralement réductrice, chargée de composés solides oxydants sous la forme de particules et également quelquefois d'un métal pulvérulent jouant le rôle de réducteur d'appoint. A ces ingrédients principaux s'ajoute un grand nombre d'additifs et de catalyseurs divers.

Les propergols actuellement utilisés de manière industrielle, sur les moteurs d'Ariane 5 notamment, portent le nom de **butalanes**[®]. La Fig. 2.4 est un cliché obtenu par microscopie électronique à balayage (MEB) sur un échantillon de butalane[®] et qui permet d'illustrer les différents constituants de ce propergol.

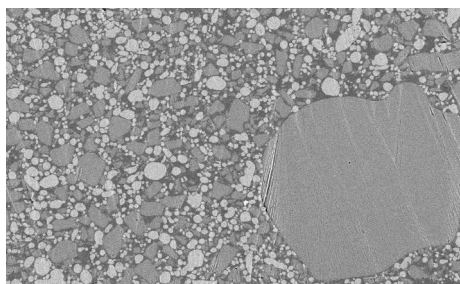


Fig. 2.4 – Photographie MEB d'une butalane[®]. Le PA apparaît en gris foncé et l'aluminium en gris clair.

La charge oxydante est constituée de **perchlorate d'ammonium (PA)**, un composé cristallin de formule chimique NH_4ClO_4 , en gris foncé sur le cliché. Le métal pulvérulent est ici de l'**aluminium (Al)** en gris très clair sur la figure. Le tout est noyé dans une matrice élastomérique constituée d'un polymère : le **polybutadiène hydroxytelchélique (PBHT)** dont le rôle est aussi de maintenir l'intégrité mécanique du système d'où son qualificatif usuel de liant. Du fait de l'emploi d'un liant

2. La production ne commencera réellement en France qu'en 1336, année durant laquelle le roi Philippe VI de Valois octroie une charte en faveur des producteurs de poudre. L'entreprise SNPE (depuis 2012, SAFRAN-Herakles), dans laquelle a été réalisée cette thèse, est donc à ce titre l'héritière d'un monopole des poudres institué par l'État depuis plus de six siècles.

polymérique, le propergol possède une consistance caoutchouteuse proche de celle d'une gomme d'écolier.

Les tailles des particules sont variables selon le propergol mais sont typiquement de l'ordre de $5\text{ }\mu\text{m}$ à $400\text{ }\mu\text{m}$ pour le PA et de $1\text{ }\mu\text{m}$ à $50\text{ }\mu\text{m}$ pour la poudre d'aluminium. Les proportions sont elles aussi variables et sont les suivantes pour le propergol d'Ariane 5 (en masse) : 68 % de PA, 18 % d'Al et 14 % de PBHT, les autres constituants étant en très faibles quantités. En termes de fraction volumique totale en particules, celle-ci se monte couramment **aux environs de 75 %**, ce qui en fait un matériau très chargé comme l'illustre au passage cette Fig. 2.4. C'est bien entendu l'usage d'une granulométrie multimodale qui permet d'obtenir ces fractions volumiques si élevées. La forme des particules de PA les plus grosses est très légèrement ellipsoïdale et la considérer comme sphérique est une approximation raisonnable.

Ces butalanes[®] sont les propergols les plus utilisés à l'heure actuelle bien que développés il y a plus de trente ans. Différentes familles nouvelles de propergols sont aujourd'hui à l'étude principalement dans le but d'en augmenter les performances. Il s'agit par exemple de remplacer le PA par des molécules encore plus énergétiques (mais aux noms moins simples!), comme l'octahydrotrinitrotetrazocine (HMX) ou l'hexanitrohexaazaisowurtzitane (CL-20), ainsi que de mettre au point des liants qui ne soient plus inertes, comme dans le cas du PBHT, mais faits de polymères eux-mêmes énergétiques (par ex., polyéther ou polyazoture de glycidyle).

2.2.2 Combustion des propergols solides

La finalité du propergol est de brûler : on comprend alors que l'étude de la combustion des propergols revête une importance certaine du point de vue industriel. Toutefois, si nous développons quelque peu cet aspect dans ce chapitre, c'est dans une autre optique. Nous verrons en effet un peu plus tard que la répartition spatiale des particules dans la matrice de liant va jouer un rôle très important sur la vitesse de combustion. En d'autres mots, la microstructure du propergol affecte la manière dont celui-ci va brûler et c'est bien ce lien que nous cherchons à mieux comprendre à travers ce travail de thèse. Ceci justifie de fournir quelques éléments de physique de combustion des propergols.

La combustion des propergols solides est toutefois relativement complexe et, encore aujourd'hui, assez mal connue. Nous ne fournissons ici que quelques généralités utiles pour la suite sans entrer dans un détail que l'on pourra trouver dans des ouvrages spécialisés (Beckstead, 2000; Kubota, 2007; Lengelle *et al.*, 2000).



Fig. 2.5 – Un propergol en pleine action... (Kubota, 2007).

A la surface du propergol en combustion se développe un système de flamme complexe d'une taille de l'ordre de quelques μm à quelques centaines de μm , soit très près de la surface (voir schéma Fig. 2.6). Il est ainsi d'usage de supposer que la combustion des propergols est un phénomène

surfacique. Le propergol ne brûle donc pas en bloc mais sa surface régresse un peu comme celle d'une cigarette (mais sans cendres!). C'est dans cette zone de surface que siègent des réactions d'oxydoréduction entre des composés générés par le PA et le PBHT et qui produisent une quantité importante de gaz chauds. Notons que l'aluminium ne participe généralement pas à cette combustion surfacique et ne joue donc pas au premier ordre sur la vitesse de combustion³. Les produits finaux de décomposition sont des molécules simples, légères et stables, principalement N_2 , H_2O , CO , CO_2 , HCl . La température des gaz de combustion est typiquement de l'ordre de 3500 K pour les butalanes[®].

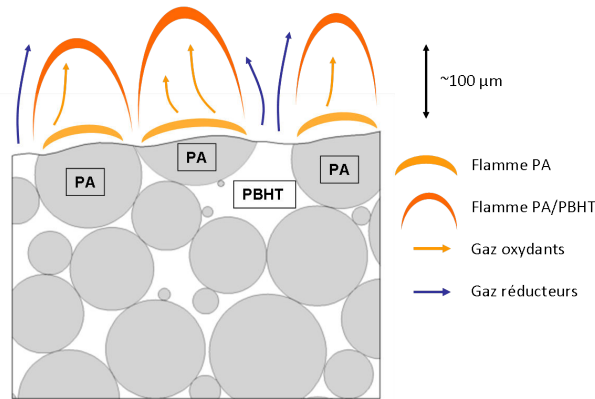


Fig. 2.6 – Schéma simplifié de la combustion d'un système PA/PBHT.

Même si la tuyère va accélérer ces gaz à des vitesses supersoniques, le propergol brûle en réalité plutôt lentement, le front régressant à des vitesses de l'ordre de quelques mm/s seulement. Cette vitesse de combustion v_c dépend principalement de la pression p dans le moteur avec une loi semi-empirique $v_c \propto p^n$ (loi de Vieille) où n est l'exposant de pression, un paramètre important en propulsion.

Cette vitesse de combustion dépend également fortement de certains paramètres de fabrication, en particulier le taux de PA et la taille des particules de PA. Cet effet est illustré sur la figure suivante (Fig. 2.7) où sont présentés des exemples de calculs théoriques de vitesse de combustion paramétrant la fraction volumique de PA (Gallier, 2003) ainsi que la taille du PA (Beckstead, 2000). L'effet sur la vitesse est manifeste et peut être très important, en particulier à travers la taille des particules du fait de modifications dans la structure du système de flammes. L'aluminium n'a quasiment pas de rôle sur la vitesse, ce qui légitime que l'on s'intéresse par la suite aux particules de PA, en particulier les plus grosses puisqu'elles sont généralement en quantité plus importante. Ainsi, si pour une raison quelconque⁴, certaines parties du chargement de propergol sont localement plus ou moins riches en PA ou localement plus riches en PA de petite taille, alors il est anticipé que la vitesse de combustion soit affectée de manière sensible. L'inhomogénéité du propergol, que ce soit en fraction volumique ou en taille de particules, aura un impact notable sur la poussée même du moteur.

2.2.3 Fabrication des propergols

La figure suivante (Fig. 2.8) présente un synoptique de la fabrication des propergols solides composites.

Cette fabrication se fait en un certain nombre d'étapes, depuis le mélange des composants jusqu'à l'assemblage final du moteur. La première étape consiste à mélanger les différents constituants dans

3. La combustion des particules d'aluminium ne débute que plus loin dans la phase gazeuse, le temps que ces particules, éjectées de la surface du propergol, ne s'allument. Cette remarque n'est pas valable pour l'aluminium nanométrique.

4. que nous verrons par la suite, il peut s'agir par exemple de migration ou de ségrégation.

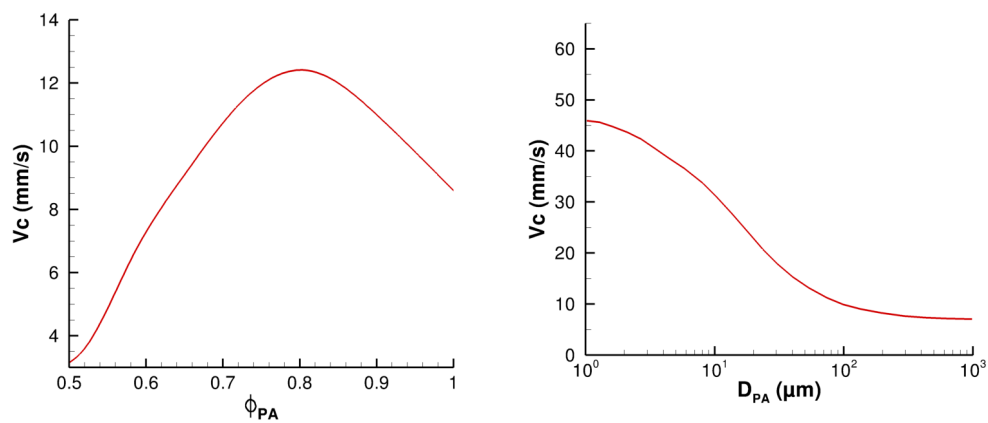


Fig. 2.7 – Effet théorique sur la vitesse de combustion de la fraction volumique de PA (à gauche) et de sa taille (à droite).

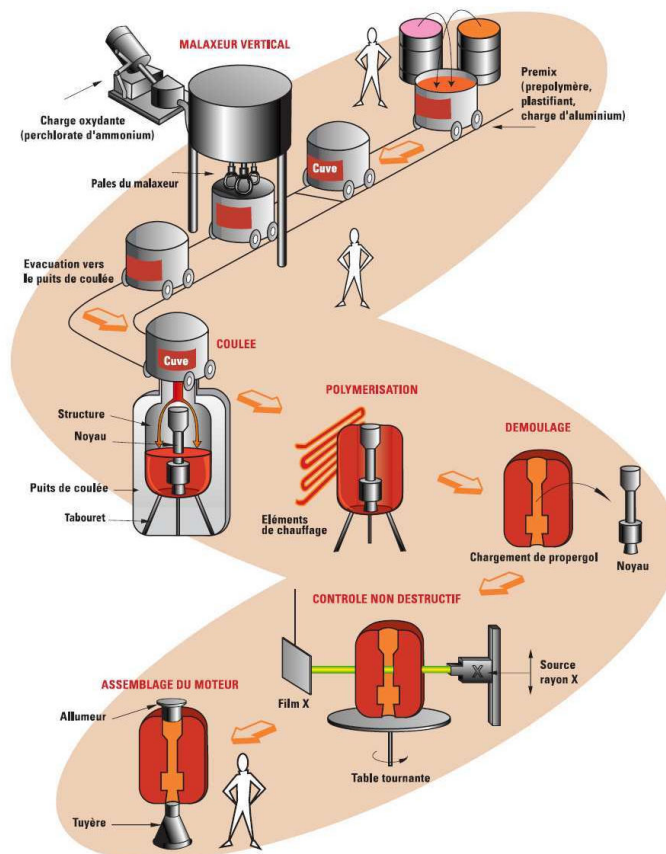


Fig. 2.8 – Fabrication d'un chargement en propergol solide composite (Tauzia, 2003).

un malaxeur (Fig. 2.9). Le polymère, auquel sont ajoutées les différentes charges (PA, aluminium), est alors sous forme liquide. On parle d'ailleurs à ce stade plutôt de prépolymère puisqu'il s'agit d'une solution liquide d'oligomères qui réticuleront par la suite pour former les chaînes polymériques. Cette phase de mélange a pour objectif d'obtenir une **suspension homogène** constituée du prépolymère liquide et de toutes les charges pulvérulentes.

C'est ensuite que la suspension de propergol est coulée, par gravité, directement dans la structure

du moteur. Cette coulée s'effectue à travers une grille (Fig. 2.9) qui permet d'éliminer une partie des bulles présentes dans le produit après le malaxage. Elle est également réalisée sous vide partiel afin de favoriser le dégazage de la pâte et d'écraser les inclusions d'air restantes par la remise à pression atmosphérique après coulée. Selon la taille du moteur, cette étape de coulée peut être effectuée en plusieurs fois. Ainsi, pour un segment S2 ou S3 d'un propulseur d'Ariane 5, dix malaxées (d'environ 11 tonnes chacune) sont successivement coulées dans un temps de l'ordre de 30 heures. Le propergol est ensuite polymérisé (réticulé) à chaud et va prendre sa forme solide définitive. Après réticulation, le noyau, qui sert à imposer la forme géométrique du chargement, est démonté et retiré du chargement. Après contrôle, le moteur est prêt pour l'assemblage final et reçoit en particulier sa tuyère et son système d'allumage.

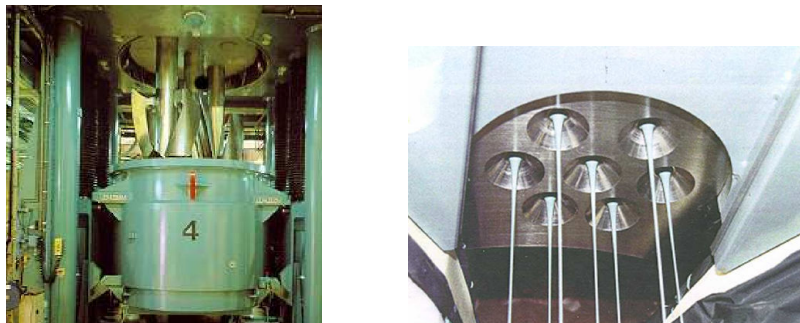


Fig. 2.9 – Malaxeur vertical et grille de coulée.

Nous retiendrons de ce procédé de fabrication que la suspension de propergol voit un certain nombre de sollicitations diverses : le malaxage, le transport dans les canaux de la grille de coulée et la coulée elle-même. L'écoulement dans la grille de coulée s'effectue avec des taux de cisaillement assez importants de l'ordre de 10 à 100 s^{-1} (Giraud et Tauzia, 1997). Quand la pâte de propergol tombe et impacte la surface de propergol précédemment coulé dans le moteur, les taux de cisaillement sont plutôt de l'ordre de 1 à 10 s^{-1} . Dans la zone de remplissage, la pâte s'écoule lentement pour remplir l'espace libre entre le noyau et la structure, l'écoulement est peu rapide et les cisaillements faibles, aux environs de 10^{-2} à 10^{-3} s^{-1} (Giraud et Tauzia, 1997).

ELÉMENTS DE RHÉOLOGIE

Sommaire

3.1	Notions de rhéologie des fluides complexes	26
3.1.1	Contrainte et viscosité	26
3.1.2	Effets non-newtoniens	28
3.2	Rhéophysique des suspensions	31
3.2.1	Fraction volumique	31
3.2.2	Tenseur des contraintes particulières	33
3.2.3	Viscosité des suspensions	35
3.2.4	Interactions dans les suspensions	37
3.2.5	Migration sous cisaillement	40
3.2.6	Sédimentation	41
3.3	Rhéologie des propergols	42

Ce chapitre présente quelques éléments de rhéologie générale et, plus particulièrement, de rhéologie des suspensions. Par suspension, nous entendons un mélange de particules solides complètement immergées dans un liquide appelé fluide interstitiel. Ce chapitre se restreindra aux suspensions de particules sphériques de même taille dans un fluide newtonien, ces dernières ayant fait l'objet de la quasi-totalité des études fondamentales. Un propergol non réticulé est donc, comme nous l'avons vu, une suspension, au même titre que du béton, du sang, de la lave, du ketchup ou du dentifrice. L'étude du comportement des suspensions est donc transverse à un vaste champ d'applications incluant la biologie ou le génie civil en passant par l'industrie agroalimentaire ou cosmétique.

La manière dont s'écoule ou se déforme la matière sous l'effet d'une sollicitation se nomme la **rhéologie**. La rhéologie d'une suspension de propergol s'avère ainsi être au cœur de notre problématique puisqu'il s'agit de mieux comprendre comment ce matériau se déforme et s'agence sous l'effet d'une sollicitation donnée. Pour ces milieux complexes toutefois, le comportement global est souvent difficile à appréhender et il peut être plus judicieux de s'intéresser à une échelle plus petite, celle des particules constituant cette suspension. L'étude du lien entre phénomènes à l'échelle des particules et comportement rhéologique global se nomme la **rhéophysique** (Coussot et Ancey, 1999b), terme qui a l'avantage d'insister sur la notion de compréhension physique des phénomènes.

La rhéophysique des suspensions, en particulier des suspensions concentrées, reste un domaine qui est loin d'avoir livré tous ses secrets. La complexité de ces matériaux est en partie liée à la multiplicité des interactions particule-particule ou fluide-particule présentes. Même le cas académique d'une suspension de sphères monodisperses dans un fluide newtonien offre une grande richesse de phénomènes, en particulier des effets non-newtoniens qui donnent l'illusion d'un matériau qui

présente tantôt le comportement d'un solide, tantôt celui d'un fluide.

3.1 Notions de rhéologie des fluides complexes

3.1.1 Contrainte et viscosité

La rhéologie est née au début du xx^e siècle⁵ avec le développement de matériaux aux comportements nouveaux et complexes, intermédiaires entre le fluide et le solide, comme les polymères, les caoutchoucs ou les peintures. Un des objectifs de la rhéologie est de préciser le lien entre la contrainte Σ (force par unité de surface) et la sollicitation vue par le matériau.

Pour un fluide, Newton (1687) propose la loi de comportement suivante :

$$\Sigma = \eta \dot{\gamma} \quad (3.1)$$

où $\dot{\gamma}$ est le gradient de vitesse, appelé par la suite taux de cisaillement. Cette relation, scalaire, s'applique pour un cisaillement simple tel que celui schématisé en Fig. 3.1. Le taux de cisaillement vaut alors $\dot{\gamma} = U/e$ où e est la distance entre les deux parois.

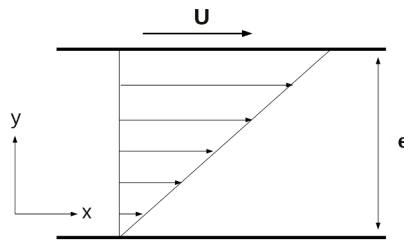


Fig. 3.1 – Cisaillement simple d'un fluide newtonien. La paroi inférieure est fixe, la paroi supérieure est animée d'une vitesse U .

Le coefficient de proportionnalité η est la viscosité dynamique de cisaillement (unité : Pa.s). Notons que dans l'industrie des propergols, l'unité préférée reste la Poise (1 P=0,1 Pa.s). La viscosité de l'eau à l'ambiante est d'environ 10^{-3} Pa.s, celle de l'huile d'olive 0,1 Pa.s, celle d'un propergol quelques centaines de Pa.s et, pour certains liquides très visqueux comme la poix, elle peut excéder 10^8 Pa.s⁶ ! Un fluide dont la viscosité ne dépend pas du taux de cisaillement est dit newtonien.

La généralisation de la relation Eq. (3.1) entre contrainte et taux de cisaillement pour un écoulement tridimensionnel quelconque impose l'usage de grandeurs non plus scalaires mais tensorielles. L'on définit ainsi le tenseur des contraintes Σ_{ij} qui exprime le rapport entre la force dF_i dans la direction i rapportée à une surface infinitésimale dS_j dont la normale est orientée dans la direction j .

La contrainte totale appliquée à un élément de fluide s'écrit alors

$$\Sigma = \tau - pI \quad (3.2)$$

où τ est la partie visqueuse des contraintes et p la pression hydrostatique.

5. Le terme rhéologie, inventé par Bingham, date de 1920.

6. L'expérience de la goutte de poix est réputée être parmi les plus vieilles expériences de physique encore en cours. Débutée en 1927 à l'université du Queensland, la poix s'écoule depuis un entonnoir à raison d'une goutte tous les 9 à 10 ans !

L'équivalent tensoriel du taux de cisaillement est lié au tenseur du gradient de vitesse \mathbf{L} qui se décompose classiquement en sa partie symétrique et antisymétrique :

$$L_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = E_{ij} + \omega_{ij} \quad (3.3)$$

$$\text{avec } E_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \text{ et } \omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.4)$$

La partie symétrique E_{ij} (tenseur du taux de déformation) traduit les déformations des éléments de fluide⁷ et la partie antisymétrique ω_{ij} (tenseur du taux de rotation) rend compte de leur rotation en bloc. Cette rotation solide ne fait pas intervenir d'interactions entre éléments voisins et n'est donc pas liée aux contraintes appliquées au fluide. L'équation constitutive du fluide relie ainsi les contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau}$ au tenseur du taux de déformation \mathbf{E} . Pour un fluide newtonien incompressible, cette équation s'écrit

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta\mathbf{E} \quad (3.5)$$

Dans le cas du cisaillement simple de la Figure 3.1, nous avons :

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ \dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ce qui permet de retrouver Eq. (3.1), soit $\Sigma_{xy} = \Sigma_{yx} = \eta\dot{\gamma}$ ainsi que $\Sigma_{xx} = \Sigma_{yy} = \Sigma_{zz} = -p$.

Notons au passage pour cet écoulement de cisaillement simple, qui sera largement considéré dans les simulations à venir, que l'Eq. (3.3) s'écrit

$$\begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ \dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ -\dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ceci signifie qu'un cisaillement simple peut être vu comme la superposition d'un écoulement élongationnel plan et d'une rotation de vitesse angulaire $-\dot{\gamma}/2 \mathbf{e}_z$ comme l'illustre la Fig. 3.2.

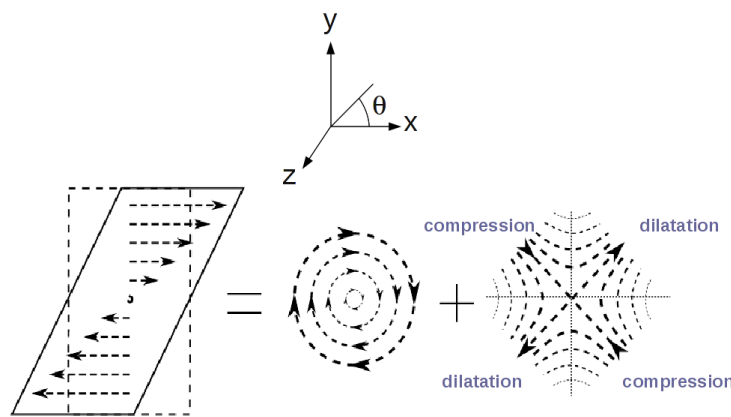


Fig. 3.2 – Décomposition d'un cisaillement simple en rotation et écoulement élongationnel.

L'écoulement élongationnel est orienté selon deux directions privilégiées. La première direction à $\theta=135^\circ$ est qualifiée d'axe de compression tandis que l'autre à $\theta=45^\circ$ est la direction de dilatation (ou

⁷ et le cas échéant, leur variation de volume. Dans le cadre de ce travail toutefois, le fluide sera supposé incompressible, soit $E_{ii} = 0$.

d'extension). Les régions du plan $xy < 0$ sont ainsi dénommées les quadrants de compression alors que les zones $xy > 0$ sont les quadrants de dilatation. La composante élongationnelle du cisaillement tend ainsi à pousser les particules les unes vers les autres selon l'axe de compression et à les éloigner dans la direction de dilatation.

En rhéologie, les contraintes normales peuvent revêtir une certaine importance. Pour des raisons pratiques, il est plus commode de s'affranchir de la pression hydrostatique en considérant les différences de contraintes normales N_1 et N_2 :

$$N_1 = \Sigma_{xx} - \Sigma_{yy} \quad (3.6)$$

$$N_2 = \Sigma_{yy} - \Sigma_{zz} \quad (3.7)$$

Pour un fluide newtonien, ces deux différences de contraintes normales sont nulles. Ce n'est toutefois pas le cas général des fluides non-newtoniens comme les suspensions.

3.1.2 Effets non-newtoniens

Avec le développement de la rhéométrie, il est apparu qu'un grand nombre de fluides comme les suspensions mais aussi les émulsions ou les polymères, ne suivait pas les lois simples décrites précédemment et offrait un comportement rhéologique plus complexe. Ces fluides sont alors qualifiés de non-newtoniens. D'après Barnes *et al.* (1989), un comportement newtonien doit, à température et pression constantes, suivre un certain nombre de caractéristiques :

- la viscosité de cisaillement η est indépendante du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$
- la viscosité est constante en fonction du temps
- les différences de contraintes normales N_1 et N_2 sont nulles en cisaillement simple

Si l'une de ces caractéristiques n'est pas remplie, le fluide est alors qualifié de non-newtonien. Les parties suivantes détaillent brièvement chacune de ces trois sources d'effet non-newtonien.

Viscosité fonction du taux de cisaillement

Le graphe suivant (Fig. 3.3) illustre quelques allures courantes de courbes d'écoulement (contrainte en fonction du taux de cisaillement).

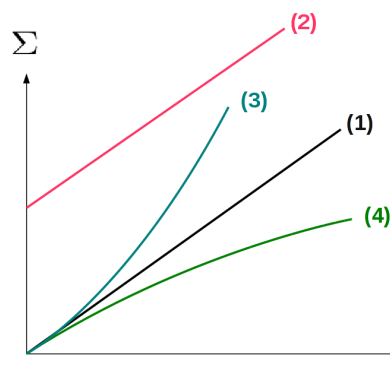


Fig. 3.3 – Contrainte en fonction du taux de cisaillement pour un fluide (1) : newtonien ; (2) : à seuil (Bingham) ; (3) : rhéoépaississant ; (4) : rhéofluidifiant

Un fluide dont la viscosité diminue avec le taux de cisaillement est qualifié de *rhéofluidifiant* et, dans le cas contraire où sa viscosité augmente avec le taux de cisaillement, de fluide *rhéoépaississant*.

De nombreux fluides non-newtoniens (sang, encres, polymères, suspensions de propergol,...) sont rhéofluidifiants. Cette rhéofluidification s'explique principalement par la destruction, avec le cisaillement, de certaines structures qui se sont formées, par exemple sous l'effet d'interactions colloïdales. Dans le cas des polymères, cette rhéofluidification traduit le désenchevêtrement de macromolécules. Pour des suspensions contenant des particules non-sphériques, l'orientation et l'alignement des particules dans le sens de l'écoulement tend également à diminuer la viscosité avec le cisaillement comme c'est le cas du sang par exemple.

Les fluides rhéoépaississants sont beaucoup moins répandus et sont souvent des suspensions très concentrées, comme les solutions colloïdales d'argile ou les suspensions concentrées d'amidon. L'origine physique est beaucoup plus discutée et, dans le cadre des suspensions, pourraient être imputables à l'apparition d'amas de particules lors de cisaillements importants. Ces amas ont été mis en évidence numériquement (Bossis et Brady, 1984; Brady et Bossis, 1985; Morris, 2009) et conduisent à une augmentation de viscosité.

Les deux phénomènes vont toutefois souvent de pair et il n'est pas rare qu'un fluide soit rhéoépaississant dans certaines gammes de taux de cisaillement et rhéofluidifiant voire newtonien dans d'autres. La Figure 3.4 représente schématiquement l'évolution de la viscosité en fonction du taux de cisaillement pour une suspension à différentes fractions volumiques de particules, entre 45 et 57% (Barnes *et al.*, 1989).

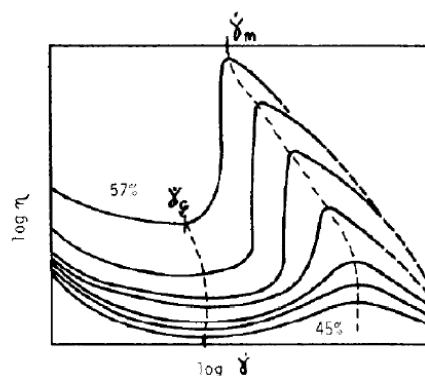


Fig. 3.4 – Evolution de la viscosité en fonction du taux de cisaillement pour une suspension à différentes fractions volumiques (Barnes *et al.*, 1989).

La suspension est globalement rhéofluidifiante pour $\dot{\gamma} < \dot{\gamma}_c$ puis devient rhéoépaississante pour $\dot{\gamma}_c < \dot{\gamma} < \dot{\gamma}_m$ avant de redevenir rhéofluidifiante pour les très forts taux de cisaillement.

Différents modèles mathématiques existent pour traduire ces effets dont le plus simple est une loi puissance (appelée aussi loi d'Ostwald-de Waele) qui s'écrit :

$$\eta = k\dot{\gamma}^{n-1}$$

L'exposant vaut $n=1$ pour un fluide newtonien et $n<1$ (resp., $n>1$) pour un fluide rhéofluidifiant (resp., rhéoépaississant).

La Figure 3.3 illustre également un autre type de comportement couramment rencontré : les fluides à seuil. Un fluide à seuil ne s'écoule que lorsque la contrainte Σ qui lui est appliquée dépasse un certain seuil Σ_c appelé contrainte critique. Lorsque $\Sigma < \Sigma_c$, le fluide ne s'écoule pas et offre ainsi un comportement de type solide. Les exemples sont nombreux y compris dans la vie quotidienne : ketchup, crèmes ou dentifrice sont des fluides à seuil. Les suspensions concentrées offrent également souvent un comportement de ce type.

Il existe plusieurs modèles décrivant le comportement rhéologique d'un fluide à seuil. Le plus simple, schématisé en Figure 3.3, est le modèle *de Bingham* : $\Sigma = \Sigma_c + k\dot{\gamma}$. Le fluide ne s'écoule qu'au-delà du seuil et présente un comportement newtonien par la suite. Certains matériaux ne présentent pas ce régime newtonien, un modèle courant est alors celui de *Herschel-Buckley*

$$\Sigma = \Sigma_c + k\dot{\gamma}^n$$

Comportement dépendant du temps

Les fluides ayant une viscosité diminuant avec le temps alors même que la contrainte appliquée reste constante sont qualifiés de *thixotropes*. C'est par exemple le cas du ketchup, du yaourt ou de certaines peintures. Ce comportement s'explique par des modifications dans la structure du fluide ayant des temps caractéristiques de l'ordre des temps d'observation. La thixotropie est souvent associée à un comportement rhéofluidifiant du fait de la destruction d'une structure interne du fluide par le cisaillement. Il existe cependant – mais plus rarement – des fluides *antithixotropes*, c'est-à-dire dont la viscosité apparente augmente avec le temps. Dans les deux cas, la réponse du fluide dépend du temps et donc de son histoire, ce qui aboutit à des effets d'hystérésis importants et donc à certaines difficultés en termes de caractérisation expérimentale.

La thixotropie est assez commune et peut apparaître dans tous les milieux possédant une microstructure – comme c'est le cas pour une suspension – puisqu'elle ne reflète en réalité que le temps fini pour évoluer entre des structures différentes. Cette notion est illustrée à travers la Figure 3.5, tirée de Barnes (1997). Le milieu se compose de certaines structures qui sont détruites sous l'effet de la sollicitation. Par la suite, un processus réversible rétablit la structuration du matériau qui avait été perdue. Un exemple concret s'appliquant à cette figure serait celui du yaourt que l'on remue pour le liquéfier mais qui reprend sa forme solide initiale après un temps de repos.

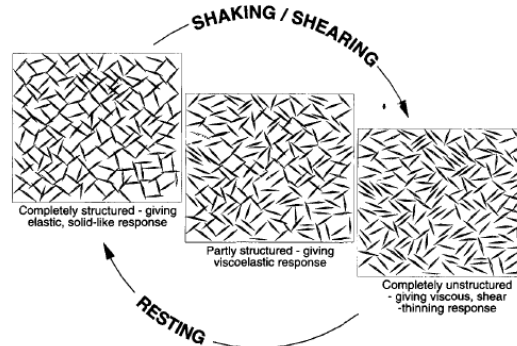


Fig. 3.5 – La thixotropie comme évolution temporelle d'une structure interne (Barnes, 1997).

Une thixotropie peut être observée dans les suspensions à travers des expériences d'inversion de cisaillement (Blanc, 2011; Bricker et Butler, 2007; Gadala-Maria et Acrivos, 1980; Kolli *et al.*, 2002; Narumi *et al.*, 2002). Une suspension étant cisailée, le sens du cisaillement est rapidement inversé. Un régime transitoire est alors observé avec une baisse brutale de la viscosité suivie d'une remontée progressive vers la valeur de viscosité avant inversion. Les travaux cités montrent sans ambiguïté que cette réponse transitoire est la manifestation d'une organisation spatiale induite par l'écoulement. Cette structure est brisée par l'inversion et se réorganise progressivement.

Contraintes normales

Dans un fluide newtonien soumis à un cisaillement simple, les contraintes normales sont égales à $-p$ et les différences de contraintes normales N_1 et N_2 sont donc nulles. Pour certains fluides non-newtoniens cependant, un simple écoulement de cisaillement peut conduire à des différences de

contraintes non nulles.

L'existence de différences de contraintes normales non nulles est courante dans les liquides polymériques et les suspensions. Dans le premier cas, elles sont liées à la déformation élastique et l'alignement des chaînes polymériques avec l'écoulement alors que dans le second cas, elles trouvent leur origine dans l'apparition d'un agencement anisotrope des particules.

Dans les polymères, la première différence N_1 est positive tandis que la seconde différence N_2 est généralement plus petite et négative. Dans les suspensions non-browniennes, elles sont généralement toutes les deux négatives bien que le débat semble loin d'être clos. Si le fait que $N_2 < 0$ soit acquis, les mesures et les simulations peuvent en effet aboutir à différentes conclusions sur le signe et l'ordre de grandeur de N_1 . L'on peut recenser $N_1 < 0$ avec $|N_1| \sim |N_2|$ (Sierou et Brady, 2002; Singh et Nott, 2003; Yeo et Maxey, 2010b), soit $N_1 < 0$ et $|N_1| < |N_2|$ (Dai *et al.*, 2013; Zarraga *et al.*, 2000) voire encore $N_1 \sim 0$ (Couturier *et al.*, 2011) ou $N_1 > 0$ (Dbouk, 2011; Dbouk *et al.*, 2013). D'une manière générale, les expériences mesurent des valeurs de $|N_1|$ plutôt faibles tandis que les calculs tendent à retrouver des $|N_1|$ plus élevés. Nous reviendrons sur ce point dans les simulations à venir.

Les contraintes normales sont à l'origine d'effets spectaculaires comme par exemple l'*effet Weissenberg* illustré en Figure 3.6. Un barreau tournant sur lui-même est immergé dans un fluide non-newtonien polymérique : sous l'effet des contraintes normales, ce dernier tend à remonter le long du barreau⁸. Notons que les suspensions montrent plutôt un effet *anti-Weissenberg* où le fluide plonge le long du barreau.

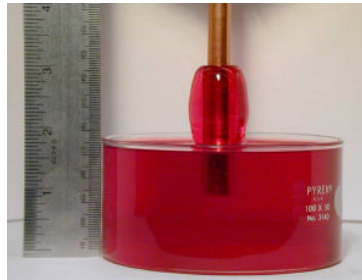


Fig. 3.6 – Un exemple d'effet Weissenberg (Bico *et al.*, 2012).

3.2 Rhéophysique des suspensions

3.2.1 Fraction volumique

Un des paramètres clés caractérisant toute suspension – et, en général, n'importe quel matériau granulaire – est la fraction volumique ϕ qui précise la proportion de particules dans le milieu. La fraction volumique est définie par le rapport entre le volume total des particules et le volume total du milieu :

$$\phi = \frac{\text{Volume des particules}}{\text{Volume total}} \quad (3.8)$$

La fraction volumique gouverne en grande partie le comportement rhéologique de la suspension. Un milieu relativement dilué pourra être vu comme un fluide visqueux tandis qu'une suspension extrêmement concentrée aura au contraire un comportement proche d'un milieu granulaire dans lequel les interactions particule-particule prédominent sur les interactions fluide-particule. Plus la fraction volumique est importante, plus la physique devient complexe. Qui plus est, aux fractions

8. Pour les cuisiniers, il s'agit du même phénomène qui explique la remontée des œufs en neige le long des tiges du batteur.

volumiques importantes, des effets stériques se manifestent. Un cas particulier d'effet stérique est la dilatance de Reynolds : au-delà d'un certain seuil en fraction volumique, il devient impossible de déplacer une particule sans en déplacer une autre. Une déformation de l'empilement nécessite ainsi un réarrangement qui s'accompagne le plus souvent d'une augmentation de volume⁹.

Il existe quelques valeurs remarquables de fraction volumique pour un système de sphères monodisperses (i.e., de même taille) et indéformables :

- $\phi_f \approx 0,49$
C'est la fraction volumique de cristallisation (*freezing*). Au-delà de cette valeur, la configuration la plus stable est une phase cristalline ordonnée. Cependant, même au-delà de ϕ_f , il est toujours possible de conserver un état désordonné (aléatoire) métastable.
- $\phi_{rlp} \approx 0,55$
Cette valeur correspond à l'empilement aléatoire connecté le plus lâche (*random loose packing*) qu'il est possible de réaliser avec des sphères (Onoda et Liniger, 1990). Cette limite est souvent considérée comme la transition d'un état liquide à un état vitreux.
- $\phi_{rcp} \approx 0,64$
C'est la limite maximale atteinte par un arrangement aléatoire de sphères monodisperses (*random close packing*) et, par conséquent, l'empilement aléatoire le plus compact possible (Scott, 1960; Scott et Kilgour, 1969).
- $\phi_{fcc} \approx 0,74$
Il s'agit de la fraction volumique maximale d'un arrangement ordonné (donc non aléatoire), obtenue pour les structures de type cubique faces centrées ou hexagonal compact¹⁰.

Le rôle majeur de la fraction volumique peut également se comprendre en terme de distance interparticulaire. L'on peut montrer que la distance moyenne surface-à-surface \bar{h} entre des sphères de rayon a aléatoirement placées suit une loi de type (Coussot et Ancey, 1999b)

$$\frac{\bar{h}}{a} \propto \left(\frac{\phi}{\phi_m}\right)^{-1/3} - 1$$

où ϕ_m dénote la fraction volumique maximale de l'empilement (avec $\phi_m = \phi_{rcp}$ pour des sphères monodisperses). Pour une configuration aléatoire de type sphères dures en équilibre, une expression théorique exacte existe pour la distance moyenne \bar{d} entre les surfaces des plus proches voisins (Torquato, 2002). Cette dernière est tracée sur le graphe suivant (Fig. 3.7) en fonction de la fraction volumique ϕ . Cette distance tend vers 0 à mesure que l'on se rapproche de l'empilement compact où toutes les sphères sont nécessairement au contact.

Pour les fractions volumiques les plus importantes, la distance entre plus proches voisins devient extrêmement faible, ce qui favorise les interactions entre particules. Soulignons que ce dernier graphe n'est valable que pour une configuration théorique aléatoire en équilibre et que les distances entre particules seront nécessairement très différentes en présence d'un écoulement.

Les systèmes où les distances interparticulaires sont de l'ordre ou supérieures au rayon d'une particule pourront être qualifiés de **dilués** : les interactions hydrodynamiques entre particules sont

9. L'exemple courant le plus souvent cité illustrant cette dilatance est l'assèchement du sable autour des pieds lorsque l'on marche sur le sable mouillé d'une plage. La déformation produite par le pied induit une dilatance du milieu qui semble s'assécher puisque l'eau descend remplir les pores nouvellement créés.

10. La valeur théorique est $\pi/\sqrt{18}$. Le fait qu'il n'existe pas d'empilement plus compact constitue la conjecture de Kepler (1611), conjecture quasiment démontrée par Hales en 2005.

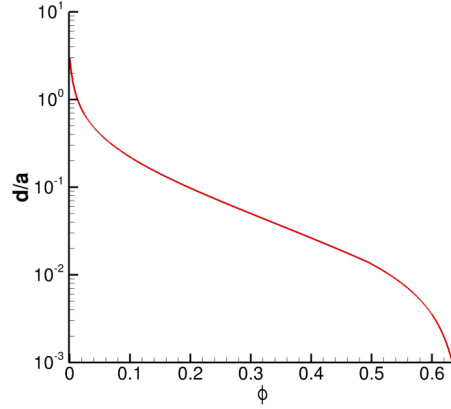


Fig. 3.7 – Distance moyenne \bar{d}/a entre surfaces des plus proches voisins en fonction de la fraction volumique (hypothèse de sphères dures en équilibre).

alors négligeables. Les suspensions sont diluées pour des fractions volumiques ϕ typiquement inférieures à quelques %. Dans le cas contraire, les interactions entre particules jouent un rôle important et l'on parle alors de suspensions **concentrées**. Il n'y a pas de limite entre dilué et concentré bien définie en termes de fraction volumique même si des valeurs de l'ordre de 30 % peuvent être proposées pour qualifier une suspension de concentrée (Ancy *et al.*, 2005; Morris, 2009). Entre ces deux limites (de quelques % à environ 30 %), l'on pourra parler de suspension semi-diluée.

3.2.2 Tenseur des contraintes particulières

Une particule suspendue librement dans un fluide induit une perturbation qui augmente le taux de dissipation visqueuse. Une suspension de particules rigides possède ainsi une viscosité effective supérieure à celle du fluide porteur. Il est possible de montrer que la présence des particules conduit à un terme de contrainte supplémentaire appelé tenseur des contraintes particulières Σ^p . En l'absence d'inertie¹¹, le tenseur des contraintes effectives observées Σ^e s'écrit comme une moyenne volumique des contraintes, soit (Batchelor, 1970; Coussot et Ancy, 1999b; Guazzelli *et al.*, 2011) :

$$\Sigma^e = \frac{1}{V} \int_V \Sigma \, dV \quad (3.9)$$

$$= \frac{1}{V} \int_{V_f} \Sigma \, dV + \frac{1}{V} \int_{V_p} \Sigma \, dV \quad (3.10)$$

où les indices f et p désignent respectivement la phase fluide et particulaire et $V = V_f + V_p$ est le volume total qui est supposé assez grand pour contenir un nombre suffisant de particules.

Dans l'équation précédente, le premier terme représente la contrainte dans le fluide qui est connue et donnée par Eq. (3.2) et Eq. (3.5) pour un fluide porteur newtonien : $\Sigma = 2\eta\mathbf{E} - p\mathbf{I}$. De plus, comme les particules ne se déforment pas, $\mathbf{E}=0$ dans V_p , soit :

$$\frac{1}{V} \int_{V_f} \mathbf{E} \, dV = \frac{1}{V} \int_V \mathbf{E} \, dV = \mathbf{E}_\infty$$

avec \mathbf{E}_∞ le tenseur du taux de déformation moyen imposé.

11. En régime inertiel, l'expression est un peu plus compliquée et pourra être trouvée dans Coussot et Ancy (1999b)

Les contraintes dans les particules, supposées rigides, sont indéterminées mais l'on peut écrire

$$\int_{V_p} \boldsymbol{\Sigma} dV = \int_{V_p} \nabla \cdot (\boldsymbol{\Sigma} \otimes \mathbf{x}) dV - \int_{V_p} (\nabla \cdot \boldsymbol{\Sigma} \otimes \mathbf{x}) dV \quad (3.11)$$

$$= \int_{S_p} (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} \otimes \mathbf{x}) dS - \int_{V_p} (\nabla \cdot \boldsymbol{\Sigma} \otimes \mathbf{x}) dV \quad (3.12)$$

où \mathbf{x} est la position par rapport au centre de gravité de la particule. Si les particules ne sont soumises à aucune force extérieure alors $\nabla \cdot \boldsymbol{\Sigma} = 0$ et le dernier terme du membre de droite est nul. En combinant ces relations, la contrainte effective s'écrit au final

$$\boldsymbol{\Sigma}^e = -P^f \mathbf{I} + 2\eta \mathbf{E}_\infty + \boldsymbol{\Sigma}^p \quad (3.13)$$

avec P^f la pression moyenne du fluide

$$P^f = \frac{1}{V} \int_{V_f} p dV \quad (3.14)$$

Le tenseur $\boldsymbol{\Sigma}^p$ est le tenseur des contraintes particulières et s'écrit

$$\boldsymbol{\Sigma}^p = \frac{1}{V} \int_{S_p} (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} \otimes \mathbf{x}) dS \quad (3.15)$$

et se décompose usuellement en sa partie symétrique et antisymétrique :

$$\boldsymbol{\Sigma}^p = \frac{1}{V} (\mathbf{S} + \mathbf{T}) \quad (3.16)$$

La partie symétrique \mathbf{S} est le **stresslet** dont le déviateur s'écrit

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \int_{S_p} (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} \otimes \mathbf{x} + \mathbf{x} \otimes \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{I} [\frac{2}{3} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}]) dS \quad (3.17)$$

La partie antisymétrique est le **rotlet** (encore parfois appelé le couplet) et vaut

$$\mathbf{T} = \frac{1}{2} \int_{S_p} (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} \otimes \mathbf{x} - \mathbf{x} \otimes \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n}) dS \quad (3.18)$$

Le rotlet est directement lié au couple hydrodynamique \mathbf{T}^h s'appliquant sur la particule via

$$\mathbf{T} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{T}^h \quad (3.19)$$

avec $\boldsymbol{\epsilon}$ le tenseur de Levi-Civita¹².

La pression particulière est définie par

$$\Pi = -\frac{1}{3} \cdot \text{Tr}(\boldsymbol{\Sigma}^p) = -\frac{1}{3V} \int_{S_p} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{x} dS \quad (3.20)$$

La présence de forces de contact induit une contribution supplémentaire à la contrainte particulière. Ce tenseur des contraintes de contact sera abordé ultérieurement en §6.6.2.

La relation Eq. (3.13) peut être directement utilisée pour déterminer la viscosité effective de la suspensions η_s . En effet, un résultat classique est qu'une sphère librement suspendue dans un

12. $\epsilon_{ijk}=1$ pour une permutation (i, j, k) paire, $\epsilon_{ijk}=-1$ pour une permutation impaire et 0 dans les autres cas.

écoulement linéaire de taux de déformation \mathbf{E}_∞ induit un stresslet d'intensité $\mathbf{S} = 20/3\pi\eta a^3 \mathbf{E}_\infty$ (Kim et Karrila, 1991). Ainsi, pour une suspension diluée de sphères, la contrainte effective s'écrit

$$\boldsymbol{\Sigma}^e = -P^f \mathbf{I} + 2\eta \mathbf{E}_\infty + \frac{20}{3}\pi\eta a^3 n \mathbf{E}_\infty \quad (3.21)$$

avec n le nombre de particules par unité de volume. Pour un cisaillement simple, cette dernière relation devient $\Sigma_{xy}^e = \eta_s \dot{\gamma}$ avec

$$\eta_s = \eta \left(1 + \frac{5}{2}\phi\right) \quad (3.22)$$

Il s'agit de la relation proposée par Einstein dès 1906 alors qu'il travaille sur le mouvement brownien (Einstein, 1906).

La contrainte particulaire $\boldsymbol{\Sigma}^p$ joue un rôle important en rhéologie des suspensions en sus de son effet direct sur la viscosité. Dans plusieurs modèles en effet, c'est le gradient de contrainte particulaire qui est le moteur de certains phénomènes comme la migration notamment (Lhuillier, 2009; Mills et Snabre, 1995; Morris et Boulay, 1999; Nott et Brady, 1994; Nott *et al.*, 2011). Dans la même idée, l'effet dit de resuspension visqueuse (Leighton et Acrivos, 1986), dans lequel des particules plus lourdes que le fluide se resuspencent dans l'écoulement dès lors qu'un cisaillement suffisant est appliqué, est également expliqué par des gradients de contrainte particulaire (Morris et Brady, 1998). C'est dans ce cas le gradient vertical $\partial \Sigma_{yy}^p / \partial y$ qui supporte le poids des particules.

3.2.3 Viscosité des suspensions

Une suspension possède une viscosité effective η_s plus élevée que celle du fluide pur η et qui ne dépend, dans le cas d'une suspension non-brownienne et non-inertielle, que de la fraction volumique ϕ (Stickel et Powell, 2005). Il est courant de définir la viscosité relative η_r comme le rapport de ces deux viscosités :

$$\eta_r = \frac{\eta_s}{\eta} \quad (3.23)$$

ainsi que la viscosité intrinsèque $[\eta]$ par

$$[\eta] = \lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{\eta_r - 1}{\phi} \quad (3.24)$$

Cette dernière grandeur est intrinsèquement liée à la forme des particules, d'où son nom. Pour des particules rigides sphériques, elle vaut $[\eta]=5/2$. La formule d'Einstein Eq. (3.22) s'écrit ainsi

$$\eta_r = 1 + [\eta]\phi \quad (3.25)$$

Cette dépendance linéaire prédite par Einstein n'est toutefois valable qu'à des fractions volumiques très faibles (typiquement $\phi \lesssim 0,02$), ce qui lui enlève généralement toute application pratique. Cette limitation est liée à l'hypothèse que le milieu doit être suffisamment dilué pour que chaque particule ne soit pas influencée par les autres (interactions hydrodynamiques négligées).

La prise en compte des interactions hydrodynamiques entre sphères requiert des termes d'ordre supérieur : les interactions entre deux sphères ajoutent ainsi un terme d'ordre deux et ainsi de suite. Batchelor et Green (1972a) et Batchelor (1977) ont ainsi étendu la relation d'Einstein à l'ordre deux, ce qui fournit :

$$\eta_r = 1 + [\eta]\phi + B\phi^2 \quad (3.26)$$

avec $B=6,2$ pour n'importe quel écoulement avec mouvement brownien et $B=7,6$ pour une suspension non-brownienne en écoulement de déformation pure. Cette formule n'est toutefois valable que

pour des régimes dilués $\phi \lesssim 0,1$.

Le domaine de validité limité de ces expressions a laissé la place aux formulations empiriques ou semi-empiriques qui, seules, permettent de prédire la divergence de la viscosité lorsque l'on s'approche de la fraction maximale ϕ_m . Ainsi, le modèle empirique d'Eilers s'écrit (Eilers, 1941)

$$\eta_r = \left(1 + \frac{\frac{1}{2}[\eta]\phi}{1 - \frac{\phi}{\phi_m}}\right)^2 \quad (3.27)$$

Un autre modèle, semi-empirique cette fois, est celui de Krieger et Dougherty (Krieger et Dougherty, 1959) obtenu en se basant sur une approche de type milieu effectif. Il est parmi les plus utilisés en rhéologie des suspensions et s'écrit :

$$\eta_r = \left(1 - \frac{\phi}{\phi_m}\right)^{-[\eta]\phi_m} \quad (3.28)$$

Il existe bien entendu un certain nombre d'autres relations proposées dans la littérature et s'accordant bien avec les données expérimentales.

Le graphe de la Fig. 3.8 présente l'allure de la viscosité relative pour les lois abordées précédemment. Ces évolutions illustrent en particulier les limites des formulations diluées ou semi-diluées comme celle d'Einstein Eq. (3.25) ou Batchelor Eq. (3.26). De même, la divergence de la viscosité, que l'on note expérimentalement, est clairement rendue à travers les formulations empiriques dès lors que l'on s'approche de la fraction maximale ϕ_m , choisie ici à $\phi_m = \phi_{rcp} = 0,64$.

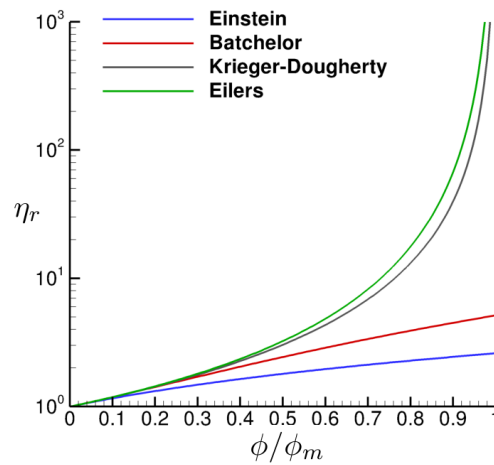


Fig. 3.8 – Viscosité relative η_r en fonction de la fraction volumique ($\phi_m = 0,64$).

Le paramètre ϕ_m est censé représenter une fraction volumique maximale pour laquelle la viscosité diverge. Il est pourtant, dans le cadre de ces formulations empiriques, considéré comme un paramètre libre permettant d'ajuster au mieux l'accord avec les données expérimentales considérées. Il peut ainsi varier sensiblement entre 0,53 et 0,70 selon les sources. Il n'y a en fait aucun argument théorique permettant de lui attribuer la valeur de l'arrangement aléatoire le plus compact $\phi_{rcp} \approx 0,64$ même si ce choix est courant. La valeur $\phi_m \approx 0,60$ correspond ainsi généralement mieux au comportement d'une suspension concentrée (voir par exemple Ovarlez *et al.* (2006)). En fait, le paramètre ϕ_m est susceptible de refléter l'état de surface des particules mais, surtout, la microstructure réelle de la suspension, ce qui a conduit certains auteurs à le faire explicitement dépendre de l'écoulement (Wildemuth et Williams, 1984).

Pour les systèmes polydisperses (i.e., à plusieurs tailles) comme les suspensions réelles de propergol, les choses sont un peu moins bien balisées du fait d'un nombre de travaux nettement plus réduit. Pour les systèmes bidisperses cependant, il semble que les formules précédentes (comme la loi de Krieger-Dougherty) soient toujours utilisables (Chang et Powell, 1994a; Gondret et Petit, 1997; Probstein *et al.*, 1994; Shapiro et Probstein, 1992) avec toutefois une valeur différente de la fraction maximale d'empilement ϕ_m . Certaines relations fournissent ainsi ce paramètre ϕ_m en fonction de la fraction volumique des petites particules et du rapport de taille β (Ouchiyama et Tanaka, 1984; Shapiro et Probstein, 1992). Toutefois, lorsque le ratio de taille est suffisamment élevé ($\beta > 10$) alors les petites particules peuvent être vues comme une phase homogène (Farris, 1968).

3.2.4 Interactions dans les suspensions

Les phénomènes physiques à l'œuvre au sein d'une suspension sont variés et expliquent en partie la richesse et la complexité de ces milieux. Les importances relatives de ces différents phénomènes peuvent être quantifiées par certains groupes adimensionnés définis ci-après. Ces nombres caractéristiques seront évalués pour une suspension typique de propergol, en choisissant les ordres de grandeur suivants : $\dot{\gamma} \approx 1 \text{ s}^{-1}$, $\eta \approx 1 \text{ Pa.s}$, $\rho \approx \rho_p \approx 10^3 \text{ kg/m}^3$ et pour des particules de taille $a \approx 100 \text{ }\mu\text{m}$.

Inertie

L'inertie du fluide est classiquement caractérisée par le nombre de Reynolds $Re = \rho UL/\eta$ où U et L désignent respectivement des échelles caractéristiques de vitesse et de taille pour l'écoulement considéré et ρ la masse volumique du fluide. Pour les écoulements particuliers, il est plus pertinent de considérer un nombre de Reynolds à l'échelle de la particule, de rayon a , avec $U \sim \dot{\gamma}a$ et $L \sim a$, soit

$$Re = \frac{\rho \dot{\gamma} a^2}{\eta}$$

L'inertie de la particule peut être estimée via son nombre de Stokes St défini comme le rapport entre un temps de relaxation τ lié à l'inertie de la particule et un temps caractéristique $\dot{\gamma}^{-1}$ lié au fluide. Pour $St \gg 1$, les particules possèdent une inertie importante et ont un mouvement quasi-indépendant de celui du fluide. Au contraire, le cas $St \ll 1$ indique que la dynamique de la particule s'adapte très rapidement au mouvement local du fluide. En régime peu inertiel, et pour une particule de masse m , nous avons $\tau = m/6\pi\eta a$, d'où

$$St = \frac{\rho_p \dot{\gamma} a^2}{18\eta}$$

avec ρ_p la masse volumique de la particule. Il ressort très clairement que ces deux nombres Re et St sont fortement liés, ce qui n'est pas étonnant outre mesure puisqu'ils traduisent tous les deux une inertie à l'échelle de la particule.

Un ordre de grandeur pour les écoulements de propergol fournit $Re = \mathcal{O}(10^{-5})$ et $St = \mathcal{O}(10^{-6})$: les suspensions de propergol sont non-inertiellles.

En régime non-inertiel ($Re \rightarrow 0$), les équations de Stokes stationnaires peuvent être résolues à la place des équations de Navier-Stokes (régime stokesien). Comme de plus $St \rightarrow 0$, les particules s'adaptent instantanément au fluide. Il n'y a pas d'effet d'histoire et l'écoulement ne dépend que de la configuration instantanée. Le mouvement des particules peut ainsi être vu comme une succession d'états quasi-stationnaires.

Mouvement brownien

Les plus petites particules peuvent être affectées par le mouvement brownien lié à l'agitation moléculaire du fluide. Le nombre de Péclet Pe compare le temps caractéristique de diffusion brownienne τ_D à un temps caractéristique de convection de la particule $\tau_C \sim a/U \sim \dot{\gamma}^{-1}$. Le temps de diffusion brownienne s'écrit $\tau_D \sim a^2/\mathcal{D}$ où \mathcal{D} est le coefficient de diffusion brownienne donné par la relation d'Einstein

$$\mathcal{D} = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}$$

où k_B est la constante de Boltzmann et T la température. Le nombre de Péclet s'écrit au final

$$Pe = \frac{6\pi\eta\dot{\gamma}a^3}{k_B T}$$

La taille de la particule joue un rôle majeur (dépendance en a^3) et l'importance du mouvement brownien reste ainsi souvent cantonnée aux particules dont la taille est inférieure au micromètre. Une suspension où $Pe \ll 1$ est qualifiée de brownienne car elle est très largement gouvernée par le mouvement aléatoire brownien. Dans le cas contraire, l'on parlera de suspension non-brownienne, typiquement dès lors que $Pe \gtrsim 1000$.

Pour une suspension de propergol typique avec $a=100 \mu\text{m}$, on obtient $Pe \approx \mathcal{O}(10^{10})$ donc un régime foncièrement non-brownien. Même dans le cas des plus petites particules $a=1 \mu\text{m}$, le nombre de Péclet est encore de l'ordre de 10^4 , ce qui montre que cet aspect brownien est clairement négligeable dans tous nos cas.

Forces colloïdales

Les particules dans une suspension peuvent également être soumises à des forces attractives ou répulsives. Les forces attractives sont généralement des forces de type Van der Waals qui sont des interactions électriques de faible intensité. Cette force de Van der Waals dépend des matériaux en présence à travers la constante de Hamaker A_H et de la distance entre particules. En pratique, la distance pour laquelle ces forces sont significatives est typiquement de l'ordre de 1 à 10 nm. Des forces répulsives d'origine électrostatique peuvent également apparaître suite à la charge électrique de la particule. Dans un environnement aqueux, cette surface chargée attire une couche de charges opposées (contre-ions) à l'interface particule/fluide créant ainsi une double couche électrique. Cette double couche se situe sur une zone en très proche périphérie de la particule, typiquement de l'ordre du nm. Ces deux interactions, attractives et répulsives, sont généralement qualifiées de colloïdales et regroupées au sein du même cadre théorique : la théorie DLVO (Deryaguine-Landau-Verwey-Overbeek).

Il est également possible de construire des nombres sans dimension permettant d'évaluer l'impact relatif de ces forces. Ainsi, l'on définit le nombre d'attraction N_a par le rapport entre la force d'attraction de Van der Waals et la force hydrodynamique, soit

$$N_a = \frac{A_H}{h^2\eta\dot{\gamma}a}$$

avec A_H la constante de Hamaker et h la distance entre surfaces des particules, choisie de l'ordre d'une taille caractéristique de rugosité $h \approx 10^{-2}a$. Avec un ordre de grandeur $A_H \approx \mathcal{O}(10^{-21})$ J, nous obtenons $N_a \approx 10^{-5}$. Ces effets colloïdaux d'attraction sont donc faibles par rapport aux effets hydrodynamiques.

L'effet de la répulsion de double couche par rapport à l'attraction de Van der Waals est fourni par le rapport $\epsilon\Psi_0^2 a / A_H$ (Abbas, 2008; Coussot et Ancey, 1999a) avec ϵ la permittivité du fluide et Ψ_0 le potentiel électrique de surface de la particule (potentiel zêta). Avec les ordres de grandeur

$\varepsilon = \mathcal{O}(10^{-10})$ F/m et $\Psi_0 = \mathcal{O}(10^{-3})$ V, ceci fournit, toujours pour $a = 100 \mu\text{m}$, une valeur de l'ordre de 10. La répulsion électrostatique est donc généralement supérieure à l'attraction de Van der Waals, sauf pour des particules nanométriques. Dans tous les cas, ces effets restent faibles devant les forces hydrodynamiques et les suspensions considérées seront supposées non-colloïdales.

Notons que dans le cas de suspensions où le fluide est un polymère, il peut aussi exister d'autres types d'interaction. C'est par exemple le cas d'interactions répulsives de type stérique où l'absorption de polymère se greffant sur la surface des particules entrave le contact entre ces dernières. Des interactions de déplétion sont également possibles : lorsque deux particules se rapprochent à une distance inférieure à la taille d'une chaîne de polymère, il se crée une pression osmotique tendant à rapprocher ces particules. Ces interactions seront supposées négligeables dans notre cas.

Forces hydrodynamiques

Les interactions hydrodynamiques sont celles qui nous concernent tout particulièrement dans le cadre de ce travail. La présence même d'une particule modifie l'écoulement du fluide dans son environnement proche. Cette perturbation est transmise par le fluide aux autres particules et va modifier leur vitesse : il s'agit de l'interaction hydrodynamique. Elle induit entre autre une augmentation de la dissipation visqueuse qui est à l'origine de l'accroissement de la viscosité dans les suspensions.

Ces interactions sont de longue portée car la perturbation de vitesse ne peut diminuer que très lentement avec la distance r . Dans le cas d'une force extérieure appliquée à une particule – la gravité par exemple – cette perturbation ne décroît qu'en $1/r$ et se propage donc sur une grande distance. Les interactions hydrodynamiques sont également de courte portée : quand deux particules sont très proches l'une de l'autre, une force intense se développe du fait de la présence de la très fine couche de fluide interstitiel qu'il devient de plus en plus difficile d'évacuer et qui s'oppose donc au rapprochement des deux particules. Cette force dite **de lubrification** sera abordée en détail ultérieurement quand il s'agira de la modéliser.

Lorsque les interactions hydrodynamiques prédominent sur les autres effets, on parle alors tout naturellement de régime hydrodynamique (ou encore de régime visqueux). Pour une particule isolée en régime de Stokes, la force de résistance visqueuse s'écrit $F = 6\pi\eta a\delta U$ où δU est la vitesse de la particule par rapport au fluide, soit une dépendance en $\eta\dot{\gamma}a^2$. Pour deux particules proches, la force de lubrification dépend en outre de la distance h entre les surfaces des particules et, pour sa composante normale, est proportionnelle à $\eta\dot{\gamma}a^2/h$. Cette force croît donc de manière importante à mesure que les particules se rapprochent et devient même singulière au contact ($h=0$).

Friction et collision

Il y a passage d'un régime visqueux à un régime frictionnel lorsque l'énergie dissipée par frottement est du même ordre de grandeur que l'énergie dissipée par le mouvement relatif des particules. Cette limite peut être identifiée par le nombre de Leighton Le qui caractérise l'importance relative des effets visqueux par rapport à une échelle de contrainte normale σ_N s'appliquant sur les particules (gravité, pression de confinement,...) et qui s'exprime par (Coussot et Ancy, 1999a,b)

$$Le = \frac{\eta\dot{\gamma}a}{h\sigma_N} \quad (3.29)$$

Le régime frictionnel est atteint lorsque le nombre de Leighton est très inférieur à 1. Dans ce cas, le réseau continu formé par contacts directs entre particules est très étendu. Dans le régime visqueux, ce réseau tend à se fragmenter, voire disparaître, sous l'effet du cisaillement.

A l'opposé, dans les régimes où la sollicitation de cisaillement est très importante, il peut y avoir des collisions du fait de l'énergie cinétique importante des particules : il s'agit ici clairement d'un régime inertiel dans lequel les temps de contact sont très courts contrairement au régime frictionnel où le contact est prolongé. La durée de vie des réseaux connectés est alors trop faible pour qu'une transmission d'effort ait lieu. Dans ce régime dit collisionnel, le mouvement d'une particule est principalement influencé par les interactions avec les autres particules comme dans le cas d'un gaz (on parle d'ailleurs de gaz granulaire). Le rapport entre l'énergie cinétique des particules et la dissipation visqueuse liée à la lubrification donne lieu au nombre de Bagnold

$$Ba = \frac{\rho_p \dot{\gamma} h a}{\eta} \quad (3.30)$$

Le nombre de Bagnold délimite le régime visqueux du régime collisionnel. Son estimation nécessite de se fixer une valeur de la distance interparticulaire h souvent choisie de l'ordre d'une taille caractéristique de rugosité, par exemple $h \approx 10^{-2}a$. On obtient alors $Ba = \mathcal{O}(10^{-7})$ ce qui montre que les suspensions étudiées ne se situent pas dans ce régime collisionnel.

La limite visqueuse/frictionnelle via le nombre de Leighton est un peu plus délicate à estimer dans la mesure où il est nécessaire de se donner en outre une échelle de contrainte σ_N . Si cette dernière est estimée comme la pression hydrostatique d'une colonne de 1 cm de propergol, alors $Le = \mathcal{O}(1)$. Ce dernier calcul n'a que peu d'intérêt sauf celui de montrer qu'il n'y a pas d'argument fort permettant de se situer d'un côté ou de l'autre de la frontière frictionnelle. Les expériences montrent en effet que les suspensions concentrées peuvent être contrôlées par le frottement (Huang *et al.*, 2005; Lombois *et al.*, 2005; Ovarlez *et al.*, 2006). Une suspension de propergol peut, selon le cas, être en régime visqueux ou en régime frictionnel. Il sera par conséquent nécessaire d'être à même de modéliser ces deux effets.

Au final, les estimations qui ont été présentées précédemment montrent qu'une suspension typique de propergol peut se trouver à la fois dans un régime hydrodynamique mais aussi, selon la fraction volumique, dans un régime qui peut être tantôt frictionnel, tantôt lubrifié. Tout le reste de l'étude se concentrera ainsi sur **des suspensions non-inertielles, non-browniennes et non-colloïdales**. Ce choix permet aussi d'orienter les modélisations à venir en insistant notamment sur l'aspect lubrification et friction.

3.2.5 Migration sous cisaillement

La migration de particules sous l'effet de l'écoulement peut être induite soit par l'inertie, soit par la non-linéarité du champ de vitesse. Dans le cadre de ce chapitre, nous abordons ce dernier cas qui est le seul phénomène responsable de la migration dans le cadre de suspensions non-inertielles. Par migration, nous entendons un déplacement corrélé d'un nombre important de particules, ceci afin de la distinguer du processus d'autodiffusion, c'est-à-dire de la dérive stochastique de la position d'une particule individuelle du fait de son comportement chaotique. Migration et autodiffusion ont toutefois la même origine physique : les interactions entre particules. La migration dépend de la taille des particules ; dans le cas de suspensions multimodales, l'on parle alors plutôt de *ségrégation* puisque les différents modes présents vont migrer à des vitesses différentes.

La première mise en évidence du phénomène date des travaux de Gadala-Maria et Acrivos (1980). En cisillant longuement une suspension dans un rhéomètre à cylindres concentriques (rhéomètre de Couette), il s'avérait que la viscosité apparente de la suspension décroissait lentement et continûment. Cet effet va être étudié en détail et formalisé un peu plus tard par Leighton et Acrivos (1987). Ces auteurs montrent que cette dérive est imputable à une migration des particules des zones à taux de cisaillement élevé vers des zones à taux de cisaillement plus faibles. En effet, les zones où le taux de cisaillement est élevé correspondent à des régions où la fréquence d'interaction entre particules est importante ce qui tend à faire migrer ces particules vers des zones de l'écoulement plus

calmes où les interactions sont moins fréquentes. Cette migration résulte ainsi en une inhomogénéité de la concentration en particules.

Leighton et Acrivos (1987) proposent une relation phénoménologique de type $\mathbf{j} = -\hat{D}(\phi)\dot{\gamma}a^2\nabla\dot{\gamma}$ où \mathbf{j} est le flux massique de particule et $\hat{D}(\phi)$ un coefficient de diffusion adimensionné. Par simulation numérique, Nott et Brady (1994) proposent une valeur de $\hat{D}(\phi) \approx 1/12$ pour des suspensions suffisamment concentrées ($\phi > 0,3$) alors que pour des régimes plus dilués, des corrélations empiriques ont été développées (Lyon et Leal, 1998). On remarquera que le flux de diffusion croît avec a^2 : la migration est donc très marquée pour les plus grosses particules.

Un modèle théorique et numérique complet a été proposé par Phillips *et al.* (1992) en se basant essentiellement sur le travail de Leighton et Acrivos (1987). Cette approche est de type homogénéisée à flux diffusif puisque les phénomènes physiques sont traduits au travers de termes diffusifs dans une équation de conservation de la fraction volumique. Le flux de diffusion total se décompose en un terme proportionnel au gradient de taux de cisaillement, un autre lié au gradient de concentration et un dernier proportionnel au gradient de viscosité (puisque l'inhomogénéité de fraction volumique induit de fait une inhomogénéité en viscosité). Ce modèle s'est avéré relativement satisfaisant sauf dans quelques situations comme les écoulements curvilinéaires. C'est notamment le cas de l'écoulement torsionnel (rhéométrie plan-plan) où le modèle prédit une migration qui expérimentalement semble très faible voire quasi-nulle (Chow *et al.*, 1994; Merhi *et al.*, 2005). Pour pallier ces limites, un nouveau terme de diffusion, fonction de la courbure locale de l'écoulement, a été introduit (Krishnan *et al.*, 1996).

D'autres approches théoriques homogénéisées s'affranchissent d'une modélisation par flux diffusif : c'est en particulier le cas des modèles à contrainte particulaire (également dénommés "*suspension balance model*") où le flux est dans ce cas supposé induit par un gradient de contrainte particulaire $\mathbf{j} \propto \nabla \cdot \Sigma^p$ (Morris et Boulay, 1999; Nott et Brady, 1994). Ce type de modèle fournit généralement des prédictions plus fidèles à la réalité (Fang *et al.*, 2002) et semble plus général bien que nécessitant une fermeture plus complexe.

La migration a également fait l'objet de simulations directes en particulier par dynamique stokésienne (Nott et Brady, 1994). Il existe également un nombre important d'études expérimentales, principalement en configuration d'écoulement de Poiseuille (Hampton *et al.*, 1997; Han *et al.*, 1999; Lyon et Leal, 1998) et écoulement de Couette à large entrefer (Leighton et Acrivos, 1987; Ovarlez *et al.*, 2006; Phillips *et al.*, 1992).

3.2.6 Sédimentation

La sédimentation n'est pas spécifiquement étudiée dans le cadre de ce travail mais peut être à l'œuvre dans les propergols puisque les particules ($\approx 2000 \text{ kg/m}^3$) sont plus denses que le fluide porteur ($\approx 1000 \text{ kg/m}^3$). Une particule sphérique de rayon a et de masse volumique ρ_p plus lourde que le fluide porteur ($\rho_p > \rho_f$) sédimente sous l'effet de la gravité \mathbf{g} . La vitesse de chute d'une particule isolée, dite vitesse de Stokes \mathbf{U}_s , se déduit simplement de l'égalité entre force de traînée d'une part et poids et poussée d'Archimède d'autre part et s'exprime par

$$\mathbf{U}_s = \frac{2}{9} \frac{a^2}{\eta} (\rho_p - \rho_f) \mathbf{g} \quad (3.31)$$

La présence d'autres particules modifie fortement cette vitesse de Stokes. Ainsi, deux sphères alignées verticalement tombent à une vitesse U_d qui s'écrit (Guazzelli *et al.*, 2011)

$$U_d = U_s \left(1 + \frac{3}{2} \frac{a}{r}\right) \quad (3.32)$$

où r est la distance entre sphères. Ainsi, un doublet vertical au contact ($r = 2a$) sédimente à une vitesse de $1,75U_s$, soit près de deux fois plus vite qu'une particule isolée, du fait d'une réduction du coefficient de traînée de l'objet (plus proche du bâtonnet que de la sphère). Les cas à plus de deux particules sont plus complexes du fait de l'apparition de mouvements périodiques ou chaotiques (Jánosi *et al.*, 1997).

La vitesse moyenne de sédimentation pour une assemblée de particules dans un volume fermé est intimement liée à la fraction volumique. De manière théorique, Batchelor (1972) parvient à écrire la vitesse moyenne de sédimentation $\langle U \rangle$ sous la forme

$$\langle U \rangle = U_s(1 - 6,55\phi) + \mathcal{O}(\phi^2) \quad (3.33)$$

Cette expression montre une diminution notable de la vitesse de sédimentation avec la fraction volumique, vitesse de sédimentation qui – dans tous les cas – est plus faible que la vitesse de Stokes, au contraire du cas du doublet de particules. En effet, dans un volume fermé, la vitesse moyenne de la suspension est nulle. Ainsi, si les particules tombent, le fluide doit nécessairement remonter et c'est ce contre-écoulement qui tend à freiner la chute des particules. L'expression de Batchelor Eq. (3.33) n'est toutefois valable que dans le cadre de suspensions très diluées. Dans la pratique, il est plus courant d'utiliser la relation empirique de Richardson-Zaki (Richardson et Zaki, 1954)

$$\langle U \rangle = U_s(1 - \phi)^5$$

Cette loi prévoit une réduction très importante de la vitesse de sédimentation avec la fraction volumique. Pour une fraction $\phi=0,5$ par exemple, la vitesse moyenne de sédimentation ne représente plus que 3 % de la vitesse de Stokes. Une suspension concentrée avec un fluide visqueux et des particules fines (un propergol par exemple...) sédimentera ainsi excessivement lentement. C'est pour cette raison que les effets de gravité seront négligés dans ce travail.

3.3 Rhéologie des propergols

Un propergol avant réticulation est une suspension. Par conséquent, tous les phénomènes physiques et interactions présentés précédemment sont a priori à l'œuvre. Bien entendu, il existe un certain nombre de spécificités comme la forme non-sphérique des charges, leur polydispersité marquée ou encore des interactions complexes (greffage de molécules sur les charges, interactions de déplétion liées au polymère ou à la présence de très fines charges,...). Malgré ceci, il semble que le comportement rhéologique d'un propergol industriel n'ait rien d'extraordinaire et soit proche de celui de suspensions modèles : des phénomènes de rhéofluidification, seuil de contrainte ou thixotropie sont ainsi attestés (Kalyon *et al.*, 1993; Miller *et al.*, 1991; Muthiah *et al.*, 1993).

Pour le propergol, le fluide porteur est le liant qui est sous la forme d'un liquide polymérique comme le très utilisé polybutadiène hydroxytélechélique (PBHT). Ce dernier a l'aspect d'une huile visqueuse avec une viscosité de l'ordre de $\eta \approx 10$ Pa.s à l'ambiante et $\eta \approx 1$ Pa.s vers 50 °C. Il est de plus quasiment newtonien : le PBHT non réticulé est en effet constitué de chaînes polymériques très courtes. Les autres types de liant présentent également la plupart du temps un comportement quasi-newtonien, ce qui légitime dans cette étude de rester dans ce cadre. Ce caractère newtonien du liant seul est également reporté par ailleurs (Miller *et al.*, 1991; Teipel et Förter-Barth, 2011).

La figure suivante Figure 3.9 présente la viscosité mesurée à 50°C pour le PBHT seul ainsi que pour un propergol typique utilisant ce liant. Ces mesures confirment clairement le comportement newtonien du liant déjà évoqué et la viscosité plus élevée (de deux ordres de grandeur) lorsque ce dernier est chargé. Ce propergol montre une rhéofluidification typique bien qu'assez peu prononcée ici, avec un exposant de l'ordre de 0,9 (loi puissance).

Ces résultats restent illustratifs dans la mesure où la viscosité peut varier de manière importante selon le propergol. De même, la rhéofluidification peut être nettement plus marquée avec des

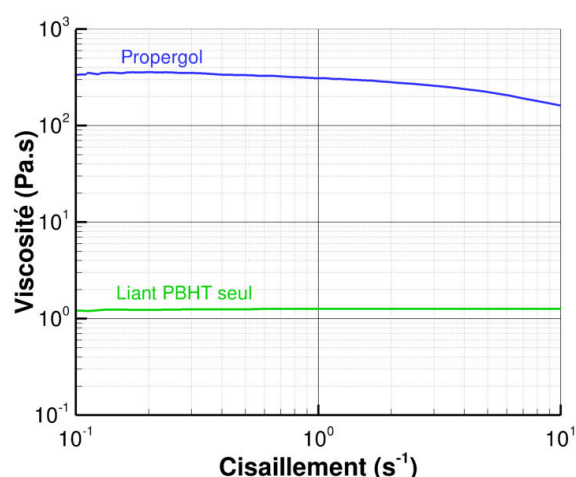


Fig. 3.9 – Viscosité pour un propergol et son liant seul (PBHT).

exposants s'échelonnant entre 0,2 et 0,9 (Giraud et Tauzia, 1997). Pour le propergol d'Ariane 5, l'exposant est de $n=0,89$ (Chounet *et al.*, 2000).

Il existe en fait peu d'études à caractère fondamental appliquées aux propergols. Miller *et al.* (1991) détaillent le comportement de deux propergols industriels typiques, l'un à base de liant PBHT et de charges de PA et l'autre à base d'un liant polyéthylène glycol (PEG) avec des charges de HMX. Ces deux propergols diffèrent de par leur fraction volumique, type et granulométrie de charges, type de liant et montrent des propriétés foncièrement différentes avec notamment une rhéofluidification beaucoup plus marquée pour le propergol PEG/HMX imputée à la floculation des très petites particules présentes. Des expériences d'inversion de cisaillement montrent des résultats très proches de ce qui est obtenu pour des suspensions modèles (Blanc, 2011; Gadala-Maria et Acrivos, 1980; Narumi *et al.*, 2002) d'où l'on conclut que des phénomènes similaires, à savoir la formation d'une microstructure anisotrope, sont présents.

Même si les études de fond manquent, ce rapide petit tour rhéologique laisse à penser que les propergols réels montrent une physique proche de celle d'une suspension modèle. A des fins de compréhension, il semble ainsi pertinent de réduire la complexité d'un propergol industriel à une simple suspension de particules non-browniennes et non-colloïdales dans un fluide newtonien.

RÔLE ET IMPACT DE LA MICROSTRUCTURE

Sommaire

4.1	Microstructure : généralités	45
4.2	Microstructure des suspensions	48
4.2.1	Sur le rôle du contact	49
4.2.2	Ordre et désordre dans les suspensions	50
4.2.3	Un peu de chaos	52
4.2.4	Percolation d'amas	52
4.3	Relation microstructure-propriétés dans les propergols	54
4.3.1	Microstructure des propergols	54
4.3.2	Inhomogénéité de la microstructure : l'effet bosse	55
4.3.3	Anisotropie de la microstructure	56

Cette partie propose une revue des principaux résultats ayant trait à la microstructure des suspensions et à son impact sur les propriétés rhéologiques. Ce point aurait certes pu être intégré lors du chapitre précédent sur la rhéologie. Toutefois, étant au centre de la problématique de ces travaux, il nous a semblé utile de s'y attarder dans un chapitre dédié. Le rôle important de la microstructure sur les propriétés rhéologiques est maintenant acquis et fait désormais l'objet d'un intérêt croissant. Une synthèse des principaux résultats est proposée dans deux articles complets de Morris (2009) et de Stickel et Powell (2005) et sur lesquels nous nous appuyons en partie pour dresser un état de l'art sur le sujet. Ce dernier se restreindra au cas de particules sphériques isodenses et en négligeant les interactions colloïdales ou browniennes.

Les études détaillées sur ces aspects microstructuraux se cantonnent évidemment à des suspensions modèles (en particulier avec des particules sphériques de même taille) bien loin des suspensions réelles de propergol. Pour autant, il existe un certain nombre de travaux qui, s'ils ne caractérisent pas la structure du propergol, démontrent toutefois sans ambiguïté le rôle capital que cette microstructure peut avoir sur les propriétés macroscopiques finales de ce propergol. Ce point fera l'objet du dernier chapitre de cette partie.

4.1 Microstructure : généralités

Une suspension, vue comme un arrangement d'une phase (les particules) dans une autre (le fluide), peut être décrite en termes de milieu hétérogène. Les phénomènes physiques d'intérêt ont lieu à l'échelle des particules et sont fortement liés à la manière dont celles-ci sont agencées. La structure spatiale à l'échelle de ces particules est dénommée **microstructure**.

Dans le chapitre précédent, il a été souligné que les propriétés effectives de la suspension, comme

sa viscosité par exemple, dépendaient fortement de la fraction volumique notamment. La fraction volumique ne reflète cependant qu'un premier niveau – global – d'information. Dans la réalité, les propriétés d'un milieu hétérogène ne sont pas fournies par de simples lois de mélange et dépendent le plus souvent d'interactions complexes entre phases. Ces dernières induisent une dépendance des propriétés effectives à la microstructure détaillée du matériau.

Un exemple parlant, inspiré de Torquato (2002), est proposé en Figure 4.1. Cette figure schématise deux milieux hétérogènes, de même fraction volumique ϕ , mais de microstructure différente. Si l'on imagine maintenant les particules comme des milieux conducteurs baignant dans une matrice isolante et que l'on s'intéresse par exemple à la conductivité (thermique ou électrique) de ces deux structures, il apparaît un comportement foncièrement différent. Les particules étant connectées, dans un cas le matériau est globalement conducteur et dans l'autre, isolant : deux propriétés extrêmes, complètement déterminées par des microstructures peu différentes au premier abord !

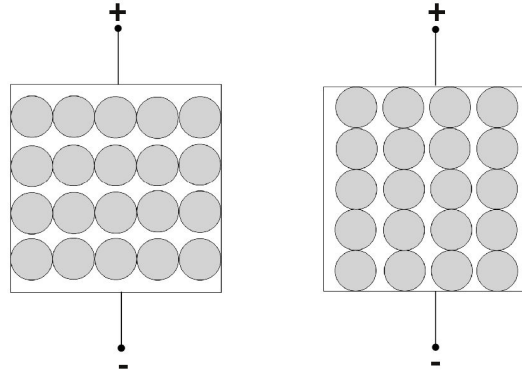


Fig. 4.1 – Deux microstructures pourtant très différentes...

Accéder aux détails de cette microstructure se fait couramment de manière statistique en développant certaines fonctions de corrélation entre particules. L'une des plus répandues est la **fonction de corrélation de paire** $g_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$. Si l'on considère la probabilité conditionnelle $P_{1|1}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ de trouver une particule en \mathbf{x}_1 étant donné qu'une particule se situe en \mathbf{x}_2 alors

$$g_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{P_{1|1}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)}{\bar{n}} \quad (4.1)$$

avec \bar{n} le nombre moyen de particules par unité de volume. Pour un système homogène et isotrope, cette fonction ne dépend plus que de la distance $r = \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|$ entre les deux particules et la fonction $g_2(r)$ prend alors souvent le nom de fonction de distribution radiale. Il est également possible de considérer des fonctions de corrélation d'ordre supérieur comme une corrélation de triplet $g_3(r)$. S'il n'y a pas ambiguïté, l'on notera $g(r)$ la fonction de corrélation de paire.

Le calcul pratique de cette fonction est assez simple et à partir d'une particule test, il suffit de compter les $dn(r)$ particules se situant dans une couronne sphérique de rayon r et d'épaisseur dr centrée sur cette particule (voir Fig. 4.2 à gauche pour une représentation schématique de cette procédure en 2D). Ce calcul est ensuite répété à chacune des particules afin d'obtenir une valeur moyenne de la fonction, soit

$$g(r) = \frac{1}{\bar{n}} \left\langle \frac{dn(r)}{4\pi r^2 dr} \right\rangle \quad (4.2)$$

Un exemple de fonction $g(r)$ est présenté en Fig. 4.2 (à droite) sur un arrangement aléatoire de sphères dures à $\phi=0,4$. Les valeurs de $g(r)$ supérieures à 1 indiquent une surconcentration en particule par rapport à une distribution complètement aléatoire. C'est ici le cas à faible distance du fait du volume exclu qui induit un ordre local. Les particules étant « dures », il ne peut y avoir interpénétration et donc $g(r)=0$ pour $r < 2a$ avec a le rayon des particules. Un peu plus loin, $g(r)$ tend rapidement vers 1 où l'on retrouve une absence d'organisation à grande distance. La valeur au

contact $g(2a)$ est finie : pour un arrangement aléatoire de sphères dures, la probabilité que deux particules soient en contact $g(2a)dr$ (avec $dr \rightarrow 0$) est donc nulle.

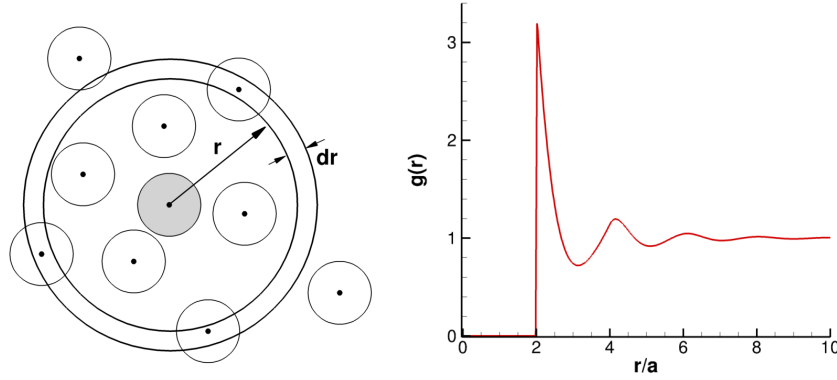


Fig. 4.2 – Illustration du calcul de $g(r)$ (à gauche) et exemple de $g(r)$ (à droite).

Dans le cas homogène mais non-isotrope – ce qui sera plutôt la situation des suspensions cisaillées comme on le verra par la suite – la fonction de corrélation dépend du vecteur $\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ qui sera évalué en coordonnées sphériques $\mathbf{r} = (r, \theta, \varphi)$ avec θ l'angle polaire mesuré à partir de l'axe x de direction de l'écoulement ($0 \leq \theta \leq 2\pi$) et φ l'angle azimutal mesuré à partir de l'axe z de direction de la vortécité ($0 \leq \varphi \leq \pi$). La construction de la fonction $g(r, \theta, \varphi)$ se fait de manière similaire en comptabilisant le nombre de particules dans les secteurs sphériques de taille $(dr, d\theta, d\varphi)$.

L'utilisation de cette fonction de corrélation peut parfois s'avérer peu précise pour mettre en évidence un ordre local, surtout quand cet ordre est naissant et très localisé dans l'espace (Rintoul et Torquato, 1996). Il est alors plus judicieux de quantifier l'ordre *orientationnel* avec d'autres estimateurs statistiques dont un des plus usités est la métrique Q_6 . Entre chacun des voisins d'une particule choisie, il est possible de calculer l'angle d'orientation (θ, φ) et d'y associer les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta, \varphi)$. La fonction Q_6 est définie par (Rintoul et Torquato, 1996; Steinhardt *et al.*, 1983; Torquato, 2002)

$$Q_6 = \sqrt{\frac{4\pi}{13} \sum_{m=-6}^6 \overline{Y_{6m}^2}} \quad (4.3)$$

où $\overline{Y_{6m}}$ représente la moyenne de l'harmonique $Y_{6m}(\theta, \varphi)$ avec tous les voisins. Ce paramètre peut être calculé pour chaque particule ou être moyenné pour caractériser le système globalement. Pour un système complètement désordonné, on a $Q_6=0$ tandis que la valeur maximale est atteinte pour une configuration cubique faces centrées ($Q_6^{CFC} \approx 0,575$). Ce paramètre est censé être un bon indicateur du caractère cristallisé ou non du système (Rintoul et Torquato, 1996) et prend une valeur spécifique et connue selon le type de structure.

Dans le même esprit que Q_6 , Kulkarni et Morris (2009) introduisent un autre paramètre d'ordre dont le but est de quantifier une structure hexagonale. Ce paramètre C_6 est défini à partir de la fonction de corrélation de paire $g(r, \theta, \varphi)$ par

$$C_6 = \max_{\psi} \frac{\int_0^{2\pi} g(2a, \pi/2, \varphi) \cos[6(\varphi - \psi)] d\varphi}{\int_0^{2\pi} g(2a, \pi/2, \varphi) d\varphi} \quad (4.4)$$

L'angle ψ est un déphasage traduisant une éventuelle inclinaison de la structure hexagonale autour de l'axe x . Ce paramètre C_6 est compris entre 0 (pour un arrangement isotrope) et 1 pour une structure

hexagonale parfaite. Il permet donc d'estimer dans quelle mesure le système cristallise sous forme hexagonale.

4.2 Microstructure des suspensions

Les premières déterminations expérimentales directes de la microstructure d'une suspension datent des travaux de Husband et Gadala-Maria (1987) en régime dilué et de Parsi et Gadala-Maria (1987) en régime concentré¹³. Ces derniers travaux, en particulier, étudient par analyse d'images une suspension concentrée à 40 % et 50 %, cisailée entre deux cylindres concentriques (rhéomètre de Couette), et parviennent à estimer la fonction de corrélation de paire $g(r)$ dans le plan de cisaillement. Il apparaît clairement qu'il y a statistiquement plus de particules dans le quadrant de compression et moins de particules dans le quadrant de dilatation. Ceci signifie que la microstructure n'est plus isotrope et que par conséquent la fonction de corrélation possède une dépendance angulaire. Ces expériences ont été reprises par la suite et mènent aux mêmes conclusions, voir par exemple Rampall *et al.* (1997) ou Blanc (2011). La figure suivante Figure 4.3, extraite de Blanc (2011), illustre très clairement cette anisotropie avec une surpopulation de particules dans le quadrant compressif, sensiblement maximale sur l'axe de compression à $\theta=135^\circ$, et une déplétion globalement orientée selon l'axe de dilatation ($\theta=45^\circ$).

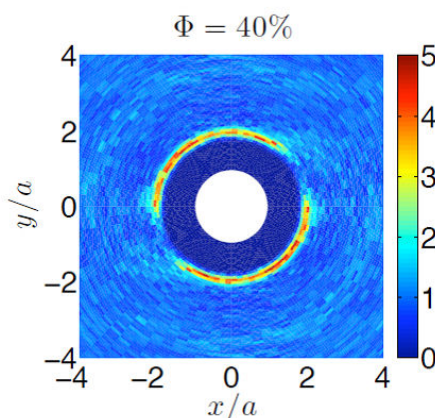


Fig. 4.3 – Mesure expérimentale de $g(x, y)$ pour une suspension à $\phi=0,4$ (Blanc, 2011).

Les simulations numériques, en particulier la méthode de dynamique stokésienne¹⁴, ont clairement confirmé le développement de ces structures anisotropes dans le plan de cisaillement et ce, de manière assez proche des résultats expérimentaux (Bossis et Brady, 1984; Brady et Bossis, 1988; Foss et Brady, 2000; Kromkamp *et al.*, 2005; Melrose et Ball, 1995; Sierou et Brady, 2002; Yeo et Maxey, 2010b). Un des intérêts du calcul, en tout cas pour les plus récents, est de pouvoir accéder à la structure spatiale tridimensionnelle précise, ce qui reste difficile d'un point de vue expérimental. Les simulations montrent que la structure reste isotrope dans le plan (y, z) orthogonal au plan de cisaillement et que par conséquent $g(r, \theta, \varphi)$ ne dépend a priori pas de l'angle φ . Ceci est vrai sauf pour les suspensions monodisperses très concentrées ($\phi \gtrsim 0,5$) où les calculs montrent que le système cristallise avec un ordre hexagonal dans le plan (y, z) (Kulkarni et Morris, 2009; Sierou et Brady, 2002).

D'un point de vue théorique, Batchelor et Green (1972a) se sont intéressés au cas infiniment dilué en étudiant une paire de particules. Ces auteurs montrent que la corrélation $g(r)$ devient

¹³. Même si cette microstructure a été mise en évidence auparavant mais de manière indirecte par des expériences d'inversion de cisaillement (Gadala-Maria et Acrivos, 1980).

¹⁴. Celle-ci sera décrite ultérieurement dans la partie consacrée aux méthodes numériques.

singulière au contact avec une loi de type $g(r) \sim (r/a - 2)^{-0,78}$, ce qui montre que dans un régime purement hydrodynamique un contact entre particules est possible. La fonction est cependant prédite symétrique, une conséquence de la réversibilité du mouvement d'une paire de particules en écoulement de Stokes. Des travaux théoriques plus généraux (Brady et Morris, 1997) soulignent de la même manière que $g(r)$ au contact suit une loi de type $g(r) \sim Pe^{0,78}$. Cette accumulation de particules se cantonne toutefois à une couche limite d'épaisseur $\mathcal{O}(aPe^{-1})$ d'où l'aspect singulier de la limite hydrodynamique pure ($Pe \rightarrow \infty$). D'après Brady et Morris (1997), cette singularité implique qu'un effet minime – comme un mouvement brownien résiduel ou une rugosité – aussi faible soit-il, résultera en une anisotropie de $g(r)$. Dans le cas d'une force de répulsion modélisant la collision, l'analyse montre que $g(r) \sim \mathcal{O}(Pe)$ dans le quadrant compressif alors que $g(r) \sim \mathcal{O}(1)$ dans le quadrant extensionnel d'où une perte de symétrie.

Toujours de manière théorique, le lien entre anisotropie et effets non-newtoniens peut être formalisé de façon plus précise. Le tenseur des contraintes hydrodynamiques peut en effet se réécrire (en régime dilué) sous une forme de type (Brady et Morris, 1997; Foss et Brady, 2000)

$$\Sigma^h \propto \eta \dot{\gamma} \phi^2 \int_{c.l.} \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E} \cdot \mathbf{n}) g(2a, \theta, \varphi) dV \quad (4.5)$$

où \mathbf{n} désigne le vecteur unitaire entre les deux particules. L'intégrale est effectuée sur la couche limite d'épaisseur aPe^{-1} . Si $g(2a, \theta, \varphi)$ possède une symétrie sphérique alors un comportement global newtonien est attendu. Dans le cas contraire, si la zone de proche contact est anisotrope, il y a apparition de contraintes normales. L'existence de ces contraintes normales est alors directement imputable à l'anisotropie de la répartition des particules. Ces travaux montrent en outre que la majeure partie de la contrainte totale reste d'origine hydrodynamique et que la contribution du contact y est faible car plus petite d'un facteur de l'ordre de $(b/a - 1)$ où b représente un rayon effectif de la particule, la quantité $b - a$ pouvant être vue comme une rugosité de la particule.

4.2.1 Sur le rôle du contact

Pour une suspension non-brownienne cisailée, la distribution des particules n'est donc plus isotrope. La raison principale invoquée pour expliquer cette perte de symétrie est liée aux contacts entre particules (DaCunha et Hinch, 1996; Davis *et al.*, 2003; Rampall *et al.*, 1997). Les forces de contact, qui sont d'origine non-hydrodynamique car non-proportionnelles à la vitesse, sont répulsives dans le quadrant de compression car elles contraignent les particules à ne pas s'interpénétrer mais elles ne sont pas attractives lorsque les particules passent dans le quadrant extensionnel et s'éloignent, d'où la perte de symétrie. Bien entendu, il faut que le contact ait effectivement lieu, ce qui n'est pas évident de prime abord du fait des forces de lubrification. En fait, ces forces de lubrification n'empêchent le contact que dans le cas – très théorique ! – de deux sphères parfaitement lisses, non-inertiels, et en supposant une hypothèse de milieu continu pour le fluide interstitiel. Dans la réalité, la présence de rugosités entraîne un contact entre particules.

Ces rugosités ont une influence notable. Elles existent inévitablement sur toutes les particules même si elles restent généralement très petites. Les tailles adimensionnées h_{rug}/a de ces rugosités, recensées dans divers travaux expérimentaux sur suspension modèle (utilisant téflon, PMMA, polystyrène, verre,...), s'échelonnent généralement entre 10^{-3} et 10^{-2} (Arp et Mason, 1977; Blanc, 2011; Davis *et al.*, 2003; Smart et Leighton, 1989; Vinogradova et Yakubov, 2003). Dans tous les cas, ces valeurs sont supérieures à 4.10^{-5} , valeur limite de distance pour les doublets liés qui ont des orbites fermées (Arp et Mason, 1977). La présence de rugosité doit ainsi nécessairement exclure l'existence de ce type de doublets, ce qui semble effectivement montré expérimentalement (Rampall *et al.*, 1997). Du fait de sa petite taille, la rugosité a peu d'impact sur la résistance au mouvement de la particule mais va jouer principalement en favorisant le contact. Le rôle de la rugosité sur l'asymétrie amont-aval a ainsi été clairement démontré (Blanc *et al.*, 2011). Dans cette étude, la fonction de

corrélation $g(r, \theta)$ est mesurée expérimentalement et comparée à un modèle théorique incluant la rugosité. L'accord entre expérience et modèle est retrouvé pour une taille de rugosité très proche de celle mesurée sur les particules utilisées.

La force de contact – ou toute autre force non-hydrodynamique d'ailleurs – va ainsi façonner la microstructure de la suspension et par conséquent modifier ses propriétés rhéologiques. Différentes études numériques mettent ainsi en évidence un impact fort de ces forces sur la microstructure ainsi que sur la viscosité ou les contraintes normales (Bricker et Butler, 2006; Drazer *et al.*, 2002, 2004; Sierou et Brady, 2002). Une force plus importante tendra ainsi à amplifier l'asymétrie amont-aval en modifiant le nombre de particules au contact avec des conséquences sur la contrainte hydrodynamique totale (voir Eq. (4.5)).

En régime dilué, des études théoriques démontrent que la rugosité diminue la viscosité et augmente les valeurs (négatives) de $|N_1|$ et $|N_2|$ (Davis *et al.*, 2003; Wilson, 2005; Wilson et Davis, 2002; Zarraga et Leighton Jr, 2001) avec une nette prédominance de $|N_2|$ sur $|N_1|$ pour les rugosités importantes (Zarraga et Leighton Jr, 2001). En régime plus concentré, des simulations par dynamique stokésienne attestent également de cette diminution de la viscosité avec la rugosité (Wilson et Davis, 2002). La raison tient au fait que la rugosité limite un contact trop rapproché (la distance étant seuillée par h_{rug}) et donc une dissipation excessive liée aux forces intenses de lubrification. Cependant, ces simulations montrent qu'en régime concentré, la rugosité tend cette fois à diminuer $|N_1|$.

Même si le rôle principal de la force de contact réside en sa composante normale de répulsion, l'impact de sa composante tangentielle (liée au frottement) a été très peu étudié. Par théorie ainsi que par simulation d'une monocouche de particule, Wilson et Davis (2002) et Davis *et al.* (2003) reportent des effets assez modérés du frottement avec une faible augmentation de la viscosité ainsi qu'une légère diminution de $|N_1|$. Sierou et Brady (2002) ont développé dans leur code 3D de dynamique stokésienne, une modélisation simplifiée du frottement et mettent numériquement en évidence une augmentation de la viscosité et de $|N_2|$ avec le coefficient de frottement μ_d ainsi qu'une diminution de $|N_1|$. Pour une fraction $\phi=0,4$, et pour μ_d entre 0 et 0,5, l'augmentation de viscosité est d'environ 10 % alors que les variations des différences de contraintes normales évoluent quasiment d'un facteur deux. Cet effet est imputable à un changement limité de microstructure mais privilégiant des configurations où $|N_1|$ est plus faible et $|N_2|$ plus fort.

A notre connaissance, il n'existe pas d'autres résultats sur le rôle du frottement sur la rhéologie des suspensions non-inertielles en cisaillement. Ce premier résultat de Sierou et Brady (2002), même s'il est partiel (modèle simplifié, une seule fraction volumique évaluée), montre un effet notable du frottement. Ceci pourrait expliquer certains résultats expérimentaux en particulier la disparité des valeurs des différences de contraintes normales. Ce point nécessite d'être approfondi et sera abordé dans la suite de ce manuscrit. Notons pour terminer que le frottement est également suspecté d'avoir un rôle majeur dans le blocage des suspensions et le rhéoépaississement discontinu (Seto *et al.*, 2013; Wyart et Cates, 2014).

4.2.2 Ordre et désordre dans les suspensions

L'apparition d'une microstructure anisotrope spécifique, liée à des effets hydrodynamiques (écoulement) et non-hydrodynamiques (contact), induit une notion d'ordre dans la configuration spatiale de la suspension. Ceci étant, rappelons que même pour une configuration aléatoire de sphères dures, un ordre local à courte distance existe toujours du fait du volume exclu (non-pénétration). Cet ordre se manifeste par une fonction de corrélation $g(r)$ non-unitaire comme déjà présenté en Fig. 4.2. Pour une suspension cisailée, tout se passe comme si ces effets de volume exclu étaient amplifiés dans certaines directions pour générer une structure anisotrope.

Cependant, cette microstructure peut présenter un caractère ordonné à plus grande distance

et ce, même dans les suspensions non-colloïdales¹⁵. Dans le cas d'une suspension cisailée, les particules tendent à s'agencer en structures globalement orientées selon l'axe de compression. Des structures plus marquées ont aussi été mises en évidence comme la formation de chaînes linéaires. Des simulations par dynamique stokésienne ont analysé les corrélations de triplet et ont en particulier montré l'apparition progressive de triplets de particules linéaires comme structure dominante (Yurkovetsky et Morris, 2006). Des simulations sur une monocouche de particules confirment ces structures linéaires qui apparaissent à des fractions modérées de l'ordre de $\phi=0,3$ (Chang et Powell, 1993). Toujours par dynamique stokésienne, mais cette fois en 3D et avec un plus grand nombre de particules, Sierou et Brady (2002) ne semblent pas noter de structures ordonnées avant $\phi=0,5$. Des chaînes linéaires de particules et des structures hexagonales apparaissent toutefois au-delà de ce seuil et perdurent jusqu'à $\phi=0,55$ avant que le système ne redevienne complètement désordonné à $\phi=0,6$. Ce comportement s'avère assez proche d'un système théorique de sphères dures monodisperses avec son point de congélation à $\phi_f \approx 0,49$. Cette phase ordonnée persiste en présence de frottement et pour différentes valeurs de force interparticulaire.

Dans le cas particulier d'un cisaillement oscillant à faible déformation, des structures de type chaînes alignées dans la direction de l'écoulement ou de type hexagonal sont également prédites numériquement et attestées expérimentalement dès $\phi=0,2$ (Bricker et Butler, 2006, 2007; Gondret et Petit, 1996).

Les parois peuvent aussi jouer un rôle important sur l'ordre de la suspension : les simulations de Yeo et Maxey (2010b) montrent en effet la formation de structures hexagonales près des parois dès $\phi=0,48$. Cet ordre peut persister sur des distances relativement importantes de l'ordre de $10a$ en régime concentré : la suspension reste donc « désordonnée » dans le cœur de l'écoulement mais s'ordonne aux parois. Cette structuration semble conduire à une baisse globale de viscosité puisqu'elle met en jeu des mouvements relatifs tangentiels entre particules dont la contribution à la viscosité est plus faible que celle de mouvements normaux. Ce type de structuration pariétale semble assez proche de visualisations expérimentales (Blanc, 2011; Metzger *et al.*, 2013).

La question de savoir si l'apparition d'un ordre est intrinsèque à une suspension cisailée ou résulte des parois ou d'effets de taille finie semble toujours ouverte. Ce dernier point est en particulier peu abordé et il ne semble pas exister de travaux étudiant le lien entre taille de domaine et transition vers un état ordonné. Numériquement, seuls Ball et Melrose (1995) notent que des structures de type chaîne linéaire ne sont retrouvées que dans de petits domaines de calcul. Par ailleurs, d'un point de vue théorique, il est connu que la taille du domaine a un impact fort sur la cristallisation d'un système de sphères dures (Rintoul et Torquato, 1996).

Une grande majorité des informations provient de la simulation numérique. D'un point de vue expérimental, il existe en effet peu de preuves de structures ordonnées pour une suspension non-brownienne non-colloïdale en cisaillement stationnaire, à part peut-être les expériences de Völtz *et al.* (2002) sur une suspension concentrée à $\phi=0,5$ en rhéomètre de Couette et qui montrent une transition assez lente vers une structure bidimensionnelle hexagonale. Comme le soulignent Sierou et Brady (2002), il est possible que ce peu de preuves expérimentales trouve son origine dans la polydispersité inhérente des particules utilisées. Une polydispersité, même faible, est en effet connue pour empêcher ou retarder la cristallisation de systèmes de sphères dures : le phénomène de cristallisation disparaît ainsi dès que la distribution de taille possède un écart-type relatif de l'ordre de 6 % (Roux *et al.*, 2007).

15. Les suspensions colloïdales sont en effet connues pour montrer, à nombres de Péclet modérés, une grande variété de structures ordonnées attestées expérimentalement et numériquement (Ackerson, 1990; Foss et Brady, 2000; Kulkarni et Morris, 2009; Phung *et al.*, 1996).

4.2.3 Un peu de chaos

Les phénomènes de diffusion et migration provoqués par le cisaillement sont une preuve du caractère irréversible d'une suspension cisailée. Cette irréversibilité peut paraître surprenante en écoulement non-inertiel puisque les équations de Stokes sont réversibles. Si tel était le cas, une suspension cisailée pendant un temps t_1 et dont on inverse le cisaillement devrait retrouver à $t=2t_1$ son exacte position initiale¹⁶. Ce n'est en réalité pas le cas comme le montrent les expériences et simulations de Pine *et al.* (2005) : la dynamique globale de la suspension est chaotique et la perte de réversibilité assez rapide, typiquement après une déformation $\dot{\gamma}t \approx 1$ pour $\phi > 0,2$. L'horizon de prédictabilité pour les suspensions concentrées est donc très réduit, de l'ordre de quelques $\dot{\gamma}^{-1}$, du fait du grand nombre de particules. Ce caractère irréversible est également démontré par des expériences similaires dans lesquelles un nuage sphérique de particules est soumis à un cisaillement oscillant, un peu comme dans l'expérience de Taylor. Ce nuage sphérique, au lieu de conserver sa forme initiale au cours des cycles de cisaillement, se disperse progressivement dans le sens de l'écoulement (Metzger et Butler, 2012). La déformation nécessaire pour conduire à l'irréversibilité est de l'ordre de celle trouvée par Pine *et al.* (2005).

Quelle est la source de cette irréversibilité dans une suspension ? Un premier élément de réponse est qu'un système contenant plus de deux particules est intrinsèquement chaotique du fait des interactions hydrodynamiques longue portée à N-corps : le cas de trois particules en sédimentation a été étudié en détail et son caractère chaotique confirmé (János *et al.*, 1997). Pour les suspensions concentrées en cisaillement toutefois, le rôle des interactions à courte portée est aussi important sinon plus. Nous avons déjà souligné que les contacts brisent la symétrie de Stokes et impliquent une perte de réversibilité temporelle, ce qui identifie les forces interparticulaires de contact comme l'origine microscopique de l'irréversibilité (Drazer *et al.*, 2002). Par ailleurs, des études expérimentales sur deux particules – ce qui exclut les interactions à N-corps – en écoulement de Couette démontrent clairement un lien fort entre l'irréversibilité et l'état de surface des particules (Popova *et al.*, 2007). Des travaux numériques ont également confirmé que l'irréversibilité et le chaos naissent des forces de contact et non pas des interactions à longue portée ou des interactions de lubrification (Metzger et Butler, 2010; Metzger *et al.*, 2013).

Quelques simulations numériques ont permis d'étudier et de caractériser cette transition vers le chaos même si celle-ci reste encore largement méconnue (Guazzelli *et al.*, 2011). Il est ainsi possible de déduire des calculs un exposant de Lyapunov¹⁷. Les simulations de Drazer *et al.* (2002) prédisent une augmentation linéaire de cet exposant entre $\phi=0,01$ et $\phi=0,35$ (gamme de fraction étudiée dans leurs travaux). Une autre étude montre des résultats similaires avec la présence d'un comportement chaotique dans toute la gamme étudiée $\phi=0,05-0,6$ et un exposant de Lyapunov croissant avec la fraction volumique (Dasan *et al.*, 2002).

4.2.4 Percolation d'amas

Dès les toutes premières simulations numériques de suspensions cisailées, un développement d'amas de particules s'agencant principalement selon l'axe de compression a été mis en évidence (Bossis et Brady, 1984). Ces amas anisotropes peuvent être particulièrement étendus et donc transmettre des contraintes importantes au sein de l'écoulement (Bossis *et al.*, 1991). En se développant et se déstructurant sous l'effet du cisaillement, ils sont soupçonnés d'être à l'origine de phénomènes de thixotropie et de rhéoépaississement (Ovarlez *et al.*, 2006). Notons au passage que l'aspect transmission de contrainte implique une certaine non-localité puisque la contrainte sur une particule peut être véhiculée, via le contact entre particules voisines, sur une grande distance. Cette

16. Comme dans la célèbre expérience de Taylor où une goutte de colorant placée dans un fluide cisailé dans un rhéomètre de Couette s'étend et semble disparaître avant de revenir à sa forme initiale quand la rotation est inversée.

17. Cet exposant caractérise la divergence des trajectoires dans l'espace des phases et donc la sensibilité aux conditions initiales.

non-localité complique grandement le développement de modélisations globales homogènes.

Un aspect crucial est que ces amas peuvent être **percolants**, c'est-à-dire former un réseau de particules connectées entre elles de part et d'autre du domaine. Cette percolation peut conduire à des effets macroscopiques notables : chaînes de force en mécanique ou transition isolant/conducteur pour la conductivité électrique ou thermique. Quelques simulations attestent de la présence d'amas effectivement percolants, orientés globalement selon l'axe de compression (Chang et Powell, 1994b; Dratler et Schowalter, 1996; Kromkamp *et al.*, 2005; Melrose et Ball, 1995). Une corrélation forte entre l'apparition d'un amas percolant et une augmentation subite de viscosité est quelquefois reportée (Chang et Powell, 1993; Lefebvre, 2007b; Singh et Nott, 2000). Cependant, la percolation dans les suspensions cisailées n'a été que très peu abordée et il reste à l'heure actuelle de nombreuses questions ouvertes sur la taille, l'apparition et le temps de vie de ces gros amas transitoires percolants. Un des objectifs de ce travail sera justement de contribuer à y répondre.

Qui dit percolation dit seuil de percolation. Il existe nécessairement un seuil en fraction volumique au-delà duquel ces amas percolants vont apparaître. Une borne supérieure est la valeur ϕ_{rlp} du réseau connecté le plus lâche dont la valeur est de l'ordre de 0,50-0,55. Ce seuil est quelquefois utilisé pour les suspensions (Coussot et Ancey, 1999a; Mills et Snabre, 2009). Peut-être est-il justifié en tant que seuil au-delà duquel il y a une probabilité unitaire de conserver un réseau connecté continu et persistant. Dans tous les cas, les simulations sur suspensions cisailées montrent l'apparition d'un réseau percolant bien en-deçà de cette valeur. Il n'existe en réalité pas de travaux spécifiques dont le but premier est de déterminer ce seuil de percolation ϕ_{cr} . Toutefois, quelques études numériques ont reporté des valeurs de fraction volumique pour lesquelles des amas percolants étaient effectivement attestés. Les quelques données recensées sont assez variables¹⁸ : $\phi_{cr} \approx 0,4$ (Phung *et al.*, 1996) ; $\phi_{cr} \approx 0,33$ (Chang et Powell, 1993) (avec toutefois une augmentation brutale de la taille du plus gros amas vers 0,25) et ϕ_{cr} entre 0,25 et 0,4 (Meunier et Bossis, 2008). Ces valeurs sont dispersées mais s'accordent en tout cas sur l'existence d'un seuil ϕ_{cr} probablement entre 0,25 et 0,4. Notons que pour toutes ces simulations, le domaine est complètement périodique donc sans aucune prise en compte de l'effet des parois.

Il n'existe pas à notre connaissance de travaux détaillés du point de vue expérimental, probablement du fait de la nécessité impérieuse de caractériser en trois dimensions et, de surcroît, avec une résolution très fine afin de définir le contact sans ambiguïté. Des études sur des suspensions bidimensionnelles de Blanc *et al.* (1983) ont toutefois permis d'estimer un seuil critique surfacique d'environ 0,68 (soit de l'ordre de 0,45 en fraction volumique) et des statistiques de taille d'amas.

Un cadre théorique sur la percolation dans les suspensions a été développé par De Gennes (1979) initialement pour expliquer l'apparition d'écoulements en bouchon (*plug flow*). De Gennes conjecture l'apparition d'amas percolants pour une fraction volumique seuil vers $\phi_{cr} \approx 0,2$ ¹⁹. La probabilité p qu'une sphère soit en contact avec ses voisines est non-nulle, indépendante du taux de cisaillement, et augmente avec ϕ . L'amas, percolant et transitoire, contient une fraction f des particules de la suspension avec f qui croît, au-delà du seuil, comme $(\phi - \phi_{cr})^\beta$. La valeur de l'exposant β n'est pas spécifiée et pourrait différer de ce qui est attendu via la théorie de la percolation ($\beta=0,39$). De même, il est proposé que la longueur de corrélation ξ_{corr} de l'amas diverge comme $a(\phi - \phi_{cr})^\nu$ avec $\nu=-0,85$. Ces conjectures n'ont jamais été vérifiées jusqu'à présent bien qu'une approche par simulation puisse sans aucune doute apporter des éléments à cette théorie. C'est d'ailleurs exactement ce que nous nous proposons de faire par la suite...

La valeur du seuil de percolation utilisée $\phi_{cr} \approx 0,2$ peut paraître un peu plus faible que les

18. De nombreuses simulations par dynamique stokésienne considèrent une monocouche de particules : la grandeur pertinente utilisée est alors la fraction surfacique ϕ_S . Nous traduisons ici tous les résultats en termes de fraction volumique avec $\phi=2/3\phi_S$.

19. Cette valeur numérique semble déduite de certains résultats expérimentaux sur suspensions colloïdales (Vadas *et al.*, 1976)

quelques données de simulation reportées. Cependant, même s'il ne semble pas y avoir de preuves expérimentales avérées, cette valeur de 0,2 se retrouve pourtant curieusement dans un certain nombre de résultats expérimentaux récents. Ainsi, pour une suspension non-brownienne et non-colloïdale, les contraintes normales ne semblent apparaître qu'au-delà de ce seuil de 0,2, ce qui est confirmé par divers types d'expériences (Boyer *et al.*, 2011; Couturier *et al.*, 2011; Dbouk, 2011). Des mesures directes de la fonction de corrélation de paire (en 2D) montrent également qu'en dessous de ce seuil, la microstructure reste assez semblable à sa limite en dilution infinie alors qu'au-delà de ce seuil, une évolution notable a lieu (Blanc, 2011). Tout cela ne garantit pas qu'il y ait assurément une percolation, comme dans la conjecture de De Gennes (1979), mais il semble au moins qu'il existe un seuil au-delà duquel s'opèrent des modifications sensibles dans la structure de la suspension. Encore une fois, ce point ne semble pas avoir fait l'objet d'études numériques détaillées.

Terminons cette partie en soulignant une éventuelle connection entre ce possible seuil de percolation vers 0,2 et une règle courante dans les milieux composites, le critère de Scher-Zallen, qui stipule qu'un réseau tridimensionnel percole à une fraction volumique de l'ordre de 0,16 (Scher et Zallen, 1970)²⁰. Ce critère s'avère fonctionner dans une très grande majorité de cas avec des seuils de percolation mesurés entre 0,1 et 0,2²¹. Ce sont en particulier des systèmes binaires aléatoires comme des alliages ou des mélanges de sphères (voir Ce-Wen (1993) pour une revue détaillée) mais aussi parfois des inclusions sphériques dispersées dans une matrice de polymère, ce qui se rapproche d'une suspension de propergol réticulée. Ces particules peuvent être du noir de carbone (Guyon et Troadec, 1994; Heaney, 1997; Liang et Yang, 2007) ou du métal (De Araujo et Rosenberg, 1976; Mamunya *et al.*, 2002). Selon certains résultats russes, la validité de ce critère de Scher-Zallen semble également confirmée pour la combustion de certains matériaux énergétiques avec un seuil de percolation vers 0,15 (Frolov et Pivkina, 1997).

L'existence expérimentale de ce seuil de Scher-Zallen est-elle à rapprocher des résultats précédents sur les suspensions, à savoir une possible percolation vers 0,2 du fait d'une structuration induite par le cisaillement? Nous laisserons là la question ouverte faute d'éléments...

4.3 Relation microstructure-propriétés dans les propergols

4.3.1 Microstructure des propergols

La pâte de propergol est une suspension et est à ce titre sujette aux phénomènes physiques évoqués dans le chapitre précédent, en particulier la diffusion sous cisaillement (migration/ségrégation) ou la structuration anisotrope. Ainsi, loin de la configuration homogène et isotrope attendue (et désirée!), la microstructure réelle du propergol va être façonnée par l'écoulement comme cela est schématisé en Figure 4.4. La microstructure (a) rend compte de la migration, avec des régions plus concentrées en particules que d'autres. La microstructure (b) schématise quant à elle la ségrégation, c'est-à-dire une migration préférentielle en taille, puisque le phénomène de migration dépend fortement de cette taille des particules. La troisième microstructure (c) illustre enfin une structuration anisotrope sous cisaillement. Les microstructures (a) et (b) sont isotropes mais non-homogènes alors que la microstructure (c) est homogène mais non-isotrope. Il serait possible de rajouter une microstructure supplémentaire – non schématisée ici – pour des particules non-sphériques, par exemple des ellipsoïdes. Du fait de l'écoulement, l'orientation de ces particules n'est

20. Ce critère, également nommé « règle des 16 % », est conjecturé en 1970 par H. Scher et R. Zallen, deux ingénieurs de Xerox. Ils remarquent que la probabilité de percolation de site, connue théoriquement pour un certain nombre de réseaux ordonnés, diffère selon les réseaux mais que la fraction volumique de percolation restait, quant à elle, relativement inchangée aux alentours de 0,16 en 3D. Leur conjecture propose ainsi que tout réseau tridimensionnel, même aléatoire, percole aux alentours de $\phi_{cr} \approx 0,16$.

21. La mesure s'effectue de manière indirecte, généralement en étudiant la transition conducteur/isolant électrique, pour un mélange constitué de deux milieux, l'un isolant, l'autre conducteur.

pas aléatoire dans le cas général, ce qui peut également conduire à une structure anisotrope (phase nématique). Notons enfin que pour une suspension isodense, non-brownienne et non-colloïdale, la microstructure induite par la sollicitation va perdurer, même une fois cette dernière arrêtée. Ainsi, même après réticulation, le propergol final conservera, à travers sa microstructure, la mémoire des sollicitations vues.

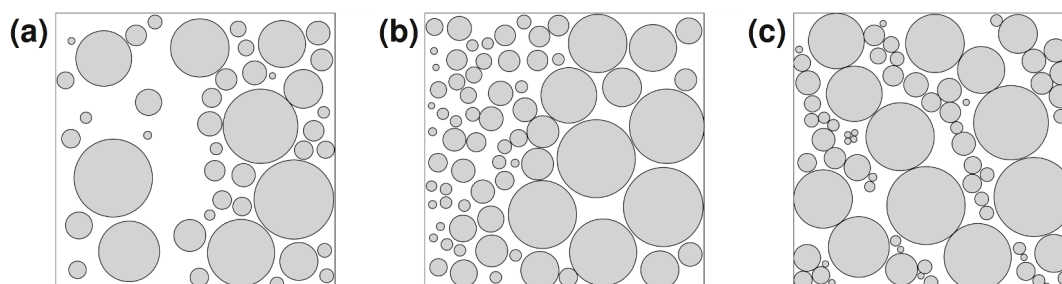


Fig. 4.4 – Microstructures schématisques : (a) migration ; (b) ségrégation ; (c) anisotropie

La caractérisation exacte de la microstructure d'un propergol solide réel n'a pas fait à ce jour l'objet d'investigations poussées. Une première étude par microtomographie à rayons X a cependant déjà permis de reconstruire la structure tridimensionnelle d'un propergol industriel et d'en calculer la fonction de corrélation de paire $g(r)$ (Gallier et Hiernard, 2008). Cette dernière s'avère assez proche de celle obtenue numériquement pour un empilement aléatoire de sphères dures en utilisant la distribution de taille réelle (et connue) des particules utilisées. Cependant, cette étude n'a pas abordé le comportement de la fonction $g(r)$ au contact et n'a pas estimé d'éventuelles variations angulaires. Plus récemment, une étude similaire par microtomographie a permis d'évaluer l'orientation des particules, cette fois supposées ellipsoïdales, dans un propergol réel (Kitagawa *et al.*, 2011). La distribution de cette orientation n'est pas uniforme et montre en particulier l'existence de directions privilégiées. Ces directions varient également selon la position où l'échantillon a été prélevé dans le bloc de propergol.

4.3.2 Inhomogénéité de la microstructure : l'effet bosse

Pour les microstructures schématisées en Figure 4.4, les propriétés macroscopiques attendues – comme la vitesse de combustion – vont être très différentes de celles que l'on obtiendrait pour une microstructure homogène et isotrope. Dans le chapitre consacré aux généralités, nous avons déjà discuté le fait que la vitesse de combustion d'un propergol dépend à la fois de la concentration locale mais aussi de la taille des particules énergétiques. La migration ou la ségrégation, en entraînant une distribution non-homogène des particules, va ainsi affecter la vitesse de combustion d'un propergol. En propulsion solide, ce phénomène est connu sous le nom **d'effet bosse**. Lorsque ces effets sont présents, la courbe de poussée (ou de pression) du moteur prend souvent une allure plus bombée, ce qui donne son nom au phénomène.

Cet effet, ainsi que son lien marqué avec le procédé de fabrication, est mis en évidence dès les années 80 (Beckman et Geisler, 1982; Friedlander et Jordan, 1984; Kallmeyer et Sayer, 1982). Des travaux plus récents ont pu attribuer ce phénomène en grande partie à une migration/ségrégation des particules de charges énergétiques lors de la coulée de la suspension de propergol dans le moteur (Ballereau, 2002; Chounet *et al.*, 2000; Le Breton et Ribéreau, 2002; Ribereau et Ballereau, 2001). La répartition inhomogène des charges conduit alors à des variations locales de vitesse de combustion au sein du propergol réticulé. Les résultats de la Fig. 4.5 illustrent ces variations locales. Dans cette expérience, un bloc de propergol de forme cylindrique à canal (le propergol est en gris sur le schéma) est découpé dans le sens radial et les différents prélèvements de propergol sont

caractérisés en vitesse de combustion. Comme le montrent ces résultats, la vitesse de combustion v_c n'est pas constante comme attendue mais varie assez sensiblement selon la position r de l'échantillon (r_1 est le rayon intérieur du canal et r_2 le rayon extérieur). En particulier, une survitesse de l'ordre de 5 % est notée en milieu de bloc ainsi que des sous-vitesse équivalentes en périphérie. Il y a probablement dans ce cas une migration des charges vers le centre du bloc lors de la coulée.

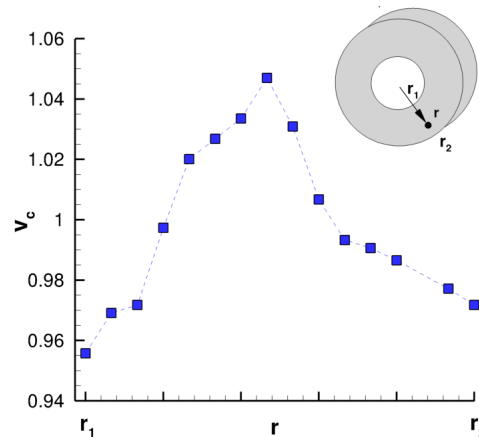


Fig. 4.5 – Vitesse de combustion locale adimensionnée dans un bloc de propergol à canal (Ballereau, 2002). r_1 et r_2 désignent respectivement le rayon intérieur et extérieur du canal central.

Cette variation de vitesse locale va entraîner à son tour une variation de la pression et donc de la poussée du moteur au cours du tir. L'écart de pression en moteur par rapport à l'attendu est typiquement de l'ordre de quelques % et peut atteindre jusqu'à 6 % ou plus (Deepak *et al.*, 2001). Cet effet bosse va donc avoir des conséquences directes en termes de fonctionnement et de performances et peut tout particulièrement être préjudiciable dans le cas de lanceurs possédant plusieurs moteurs (deux pour Ariane 5) du fait du déséquilibre de poussée entre ces moteurs.

Le phénomène de migration des charges sur une suspension de propergol a également été démontré sur un écoulement de type Poiseuille : le propergol est injecté dans une conduite et des prélèvements sont effectués au centre et en périphérie de la conduite. Dans ce type de configuration, les charges migrent vers le centre de l'écoulement (Hampton *et al.*, 1997; Han *et al.*, 1999; Lyon et Leal, 1998). Pour le cas d'un propergol Ariane 5, les écarts mesurés de densité entre centre et périphérie sont de l'ordre de 0,3 % (Chounet *et al.*, 2000). Ceci équivaut à des variations, en termes de fraction locale de charges, suffisantes pour entraîner un effet sensible sur la vitesse de combustion.

4.3.3 Anisotropie de la microstructure

Le rôle de l'anisotropie de la microstructure sur la vitesse de combustion est beaucoup moins bien appréhendé et reste actuellement au niveau de la conjecture. Toutefois, si certains auteurs expliquent l'effet bosse par la migration/ségrégation des charges comme nous venons de le voir, d'autres voient suggérer que cet effet pourrait être lié à l'arrangement anisotrope des charges du fait de leur forme non-sphérique (Heister, 1993; Koury, 1973). Les particules seraient alors orientées de manière non-aléatoire selon certaines directions. Comme la vitesse de combustion est fonction de la taille des particules et donc ici, de la surface normale au front de combustion, cette répartition anisotrope va modifier en conséquence la vitesse du propergol. Les résultats en microtomographie déjà cités (Kitagawa *et al.*, 2011) montrent effectivement des orientations privilégiées mais également une corrélation forte entre l'orientation des charges et la vitesse de combustion locale. Dans une étude plus ancienne, Lee *et al.* (1989) montrent que lors d'un écoulement unidirectionnel de pâte

de propergol PA/PBHT, la vitesse de combustion moyenne dans la direction de l'écoulement était supérieure à celle obtenue perpendiculairement à l'écoulement, entre 2 et 8 % selon la granulométrie du PA, ce qui tend à montrer l'apparition d'une structure anisotrope.

En l'état actuel des connaissances, il semble donc que la migration soit un phénomène avéré mais que l'anisotropie de la structure induite par l'écoulement puisse également jouer un rôle non négligeable. Il est toutefois difficile de savoir dans le cas général si cette anisotropie est liée à la forme légèrement non-sphérique des charges ou alors à la formation d'une structuration anisotrope comme nous l'avons vu pour les suspensions de sphères cisailées. Dans ce dernier cas en particulier, les structures obtenues sont supposées pouvoir percoler. Or, un possible effet de la percolation sur la vitesse de combustion a quelquefois été recensé dans la littérature. Certains résultats expérimentaux russes montrent en effet une augmentation rapide de la vitesse de combustion pour certains systèmes lorsque la fraction volumique en charge excède un seuil entre 0,15 et 0,25 (Fogelzang *et al.*, 2000; Frolov et Pivkina, 2007, 1997). Ce changement de régime est attribué à la percolation. Par ailleurs, des modèles prédictifs de vitesse de combustion basés sur la notion de percolation des charges ont été développés par le passé avec un certain succès (Grinchuk et Rabinovich, 2004; Kerstein, 1987). Notons enfin que par simulation numérique, nous avons pu amener de premiers éléments démontrant qu'un éventuel réseau percolant modifiait sensiblement la vitesse de régression d'un propergol idéalisé (Gallier et Guery, 2009). La combustion progresse alors rapidement à travers le réseau connecté de charges et augmente notablement la vitesse moyenne.

Terminons cette partie en soulignant que même si le travail présent se cristallise sur la vitesse de combustion, le rôle majeur de la microstructure sur les propriétés macroscopiques fonctionnelles des propergols est présent dans un certain nombre de domaines comme par exemple les propriétés mécaniques (Azoug, 2010; Matouš *et al.*, 2007) ou le claquage diélectrique (Gallier, 2010).

DEUXIÈME PARTIE

Approche numérique pour la simulation des suspensions

MÉTHODES NUMÉRIQUES POUR LES ÉCOULEMENTS PARTICULAIRES

Sommaire

5.1	Etude bibliographique	61
5.1.1	Macro ou micro ?	61
5.1.2	Approches macroscopiques : un aperçu	62
5.1.3	Approches microscopiques	65
5.2	Critères de choix et approche retenue	71

L'omniprésence des écoulements fluide/particule (dans le domaine de l'agroalimentaire, des cosmétiques, du génie civil, de la météorologie,...) a donné lieu au développement de nombreuses approches numériques permettant de mieux comprendre et prédire le comportement complexe de tels systèmes.

Nous proposons ici un aperçu des méthodes numériques utilisées dans les écoulements particuliers. Cette étude bibliographique a pour objectif de dresser un panorama des différentes stratégies existantes afin de justifier le choix d'une approche au détriment d'une autre.

Un point capital à noter est qu'au vu de la problématique envisagée, nous nous focaliserons sur des approches où le **fluide est résolu**. Ainsi, les méthodes de type DEM ("*Discrete Element Method*") par exemple, qui sont courantes dans la communauté des granulaires secs²², ne seront pas abordées dans cette partie bibliographique. Elles privilégient en effet les interactions entre particules, le fluide ne jouant alors qu'un rôle mineur (voire nul). Pour autant, ces stratégies peuvent être intégrées dans une approche fluide mais en tant que modélisation additionnelle des interactions entre particules (ce qui sera effectivement le cas dans notre approche...).

5.1 Etude bibliographique

5.1.1 Macro ou micro ?

Une première taxonomie des modèles peut être effectuée en fonction de l'échelle spatiale traitée. Soit l une taille caractéristique des particules et Δ une taille caractéristique de la discrétisation spatiale. Il est alors possible de scinder les méthodes en deux familles comme l'illustre la Figure 5.1 : d'un côté, des approches qualifiées de **microscopiques** ($l \gg \Delta$) et de l'autre, des approches **macroscopiques** ($l \ll \Delta$). Dans le premier cas, l'on se situe à l'échelle de la particule : l'écoulement

22. Quelques exemples : écoulements de sable, de grains ou de poudres, avalanches, transport sédimentaire, mécanique des sols,...

fluide ainsi que les interactions fluide/particule sont explicitement et complètement résolus. La dénomination de **simulation directe** est souvent employée pour caractériser cette vision dans laquelle aucune modélisation additionnelle n'est ajoutée aux équations de Navier-Stokes. Dans le second cas, l'écoulement global est résolu mais pas les particules qui sont supposées ponctuelles. Les interactions sont alors modélisées de manière globale par des lois *ad hoc* (par exemple des corrélations empiriques sur des lois de traînée).

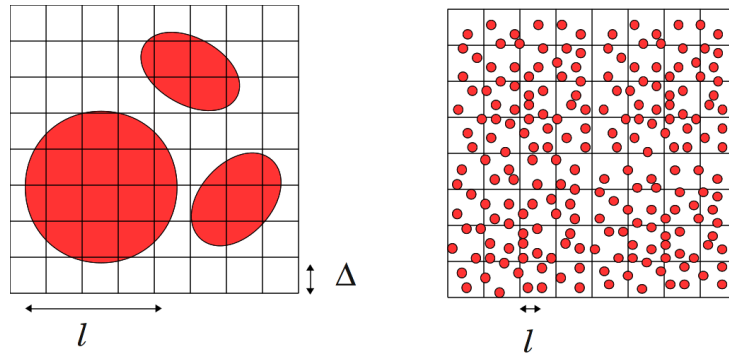


Fig. 5.1 – Approches microscopiques et macroscopiques.

Ces deux visions répondent à des attentes bien différentes. Dans le cas microscopique, les deux phases et toutes leurs interactions sont résolues finement et sans modèle supplémentaire. De ce fait, cette approche reste cantonnée à des géométries académiques et à des nombres de particules limités (de l'ordre de 10^3) du fait d'une demande de puissance de calcul très importante. Dans le cas macroscopique, la richesse d'une approche complètement résolue est perdue mais il devient possible en contrepartie de traiter des configurations complexes et/ou de grande taille. C'est particulièrement le cas pour les problématiques industrielles où seule une réponse macroscopique moyenne est généralement recherchée. Tout est donc question du niveau de détail souhaité!

A titre d'exemple – et pour retourner dans le domaine des propergols – 1 kg d'une composition typique contient de l'ordre de 10^{11} particules dont les plus petites sont de taille submicronique. Il serait bien entendu illusoire (et inutile) de traiter ce cas à l'échelle de la particule!

Dans le cadre de ce travail, nous nous intéresserons surtout à la configuration spatiale des particules dans l'écoulement et il est donc nécessaire de prendre en compte finement toutes les interactions possibles. Ceci justifie évidemment de se tourner vers des approches microscopiques. Nous présenterons toutefois succinctement les approches macroscopiques.

5.1.2 Approches macroscopiques : un aperçu

Dans la mesure où ce type d'approche ne sera pas utilisé dans le cadre de ce travail, nous ne dressons qu'un aperçu rapide de ces méthodes pourtant très prisées dans l'industrie pour les raisons qui viennent d'être évoquées.

Le fluide est généralement résolu de manière eulérienne (c'est-à-dire sur un maillage fixe). La phase particulaire peut par contre être traitée soit de manière lagrangienne (méthodes Euler-Lagrange), soit eulérienne (méthodes Euler-Euler).

Méthodes Euler-Lagrange

Cette méthode pourrait s'apparenter à une approche microscopique au premier abord. Le fluide est résolu et les particules sont traitées de manière lagrangienne. Ces dernières sont donc suivies

individuellement et leurs vitesses sont calculées en utilisant les équations de Newton, soit :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}_p}{dt} &= \mathbf{u}_p \\ m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} &= \mathbf{F}(\mathbf{u}_p, \mathbf{u}_f, t) \end{aligned} \quad (5.1)$$

où m_p est la masse d'une particule, \mathbf{u}_p sa vitesse et \mathbf{u}_f la vitesse du fluide.

L'aspect macroscopique provient du fait que d'une part, les particules sont supposées ponctuelles et que, d'autre part, les interactions fluide/particule ne sont pas résolues explicitement mais via des lois globales sur les forces mises en jeu (fonction \mathbf{F}). Des corrélations empiriques sont employées pour la loi de traînée par exemple mais également pour les forces de portance, de masse ajoutée, les forces de Basset (effet d'histoire), etc. Bien entendu, rien de tout cela ne serait à modéliser dans le cas d'une approche microscopique puisque calculé explicitement.

Dans la pratique, il n'est numériquement pas possible de suivre autant de particules que ne l'exigerait la réalité physique (repensons à nos 10^{11} particules de notre kg de propergol...). En réalité, chaque particule numériquement suivie est en fait une « super-particule » censée en représenter un grand nombre. Dans tous les cas, ces méthodes lagrangiennes nécessitent souvent le suivi d'un nombre important de particules pour être représentatives. Elles sont donc assez coûteuses en temps calcul et avantageusement utilisées lorsque les fractions volumiques restent faibles. En contrepartie, elles sont relativement simples à intégrer et bien adaptées à l'ajout de modèles physiques supplémentaires pour les particules (par exemple collision, rotation, combustion,...). C'est en particulier une méthode courante pour étudier les interactions particule/turbulence (Portela et Oliemans, 2003; Wang et Squires, 1996).

Méthodes Euler-Euler

L'approche Euler-Euler considère le système diphasique comme deux milieux continus s'interpénétrant, d'où la qualification courante de modèle à deux fluides. En tout point, il y a simultanément coexistence de ces deux phases. Les particules ne sont donc plus individualisées et sont représentées uniquement par des grandeurs globales. Une quantité importante est la fraction volumique ϕ indiquant la quantité respective de chaque phase.

Par nature, cette approche offre une description moyennée du système. L'opération de moyenne (qui peut être temporelle, volumique ou d'ensemble) permet d'aboutir à deux jeux d'équations de conservation, une pour la phase fluide, l'autre pour la phase particulaire. De ce fait, le coût calcul ne dépend plus du nombre de particules, ce qui rend cette méthode particulièrement attrayante pour les systèmes industriels où un grand nombre de particules est mis en jeu. C'est par exemple le cas des écoulements dans les moteurs à propergol solide (Gallier et Godfroy, 2009; Simoes *et al.*, 2005). En contrepartie, certains détails microscopiques sont irrémédiablement perdus, ce qui nécessite des efforts de modélisation spécifiques, pour toutes les interactions notamment.

La moyenne des équations locales de conservation fournit un système de conservation moyenné qui prend l'expression générale suivante pour la masse et la quantité de mouvement (et en l'absence de transfert de masse) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \phi_k) + \nabla \cdot (\rho_k \phi_k \mathbf{\bar{u}}_k) = 0 \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \phi_k \mathbf{\bar{u}}_k) + \nabla \cdot (\rho_k \phi_k \mathbf{\bar{u}}_k \otimes \mathbf{\bar{u}}_k) = \nabla \cdot (\phi_k \mathbf{\Sigma}_k) \pm \mathbf{f}_k \quad (5.3)$$

où $k = (f, p)$ peut désigner la phase fluide (f) ou particulaire (p) et \mathbf{f}_k représente les forces d'interaction mutuelle entre les phases (+ pour une phase, – pour l'autre). Ces forces sont estimées

via des lois empiriques comme dans le cas précédent Euler-Lagrange.

Dans le système d'équation précédent, la vitesse $\bar{\mathbf{u}}_k$ est la vitesse obtenue après l'opération de moyenne. C'est donc une fonction continue et définie dans tout le domaine. La vitesse instantanée d'une phase \mathbf{u}_k est quant à elle discontinue car elle n'a d'existence qu'à l'intérieur de la phase considérée. Il existe en conséquence une fluctuation $\mathbf{u}'_k = \mathbf{u}_k - \bar{\mathbf{u}}_k$ de moyenne nulle mais de produit croisé $\overline{\mathbf{u}'_k \otimes \mathbf{u}'_k}$ non nul et qu'il est nécessaire de modéliser (ce terme n'apparaît pas dans Eq. (5.3) car intégré dans la contrainte Σ_k). Ce n'est évidemment pas sans rappeler les problèmes de fermeture très similaires que l'on trouve dans les modèles de turbulence de type RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes).

Les attraites des approches Euler-Euler ont donné lieu à tout un panel de modèles différents que nous ne détaillerons pas plus ici. Un aperçu pourra être trouvé dans Simoes (2006, p.91).

Méthodes Euler-Euler en rhéologie des suspensions

Ces approches purement eulériennes sont également d'un intérêt notable en rhéologie des suspensions et sont notamment le réceptacle de modèles pour la physique de la migration des particules. L'on pourra ainsi citer les modèles dits « à flux diffusif » (Leighton et Acrivos, 1987; Phillips *et al.*, 1992) dans lesquels un flux de masse additionnel est adjoint à l'équation de conservation de la masse particulaire Eq. (5.2). L'équation d'évolution sur la fraction volumique ϕ de particules se simplifie alors en

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \phi = -\nabla \cdot \mathbf{j} \quad (5.4)$$

où \mathbf{j} est le flux de migration des particules et $\bar{\mathbf{u}}$ la vitesse moyenne de la suspension. Les expressions pour ce flux \mathbf{j} sont semi-empiriques et sont par exemple issues de Phillips *et al.* (1992).

Des approches qualifiées de "*suspension balance*" (Morris et Boulay, 1999; Nott et Brady, 1994) ont été proposées plus récemment. Elles se basent sur le fait que le phénomène de migration trouve son origine physique dans une inhomogénéité de la contrainte liée à la présence des particules. La migration opère ainsi pour « équilibrer »²³ la contrainte particulaire de la suspension. Contrairement au modèle précédent qui restait plutôt phénoménologique, ces approches s'appuient sur une description plus fondamentale, basée sur les équations de conservation pour la suspension :

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0 \quad (5.5)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}} \right) = \nabla \cdot \Sigma \quad (5.6)$$

avec $\Sigma = \Sigma^f + \Sigma^p$ le tenseur des contraintes de la suspension qui se décompose en une contribution du fluide Σ^f et des particules Σ^p . La conservation de la quantité de mouvement pour la phase particulaire permet d'obtenir une expression du flux de migration \mathbf{j} :

$$\mathbf{j} = \frac{2a^2}{9\eta} f(\phi) \nabla \cdot \Sigma^p \quad (5.7)$$

avec a le rayon de la particule, η la viscosité du fluide et $f(\phi)$ une fonction dite de freinage ("*hindrance function*") qui ne dépend que de la fraction volumique. Le tenseur de contrainte particulaire Σ^p est fonction de la fraction volumique et du cisaillement $\dot{\gamma}$, soit $\Sigma^p = F(\phi, \dot{\gamma})$. Ainsi, si le champ de ϕ ou de $\dot{\gamma}$ varie spatialement alors $\nabla \cdot \Sigma^p$ n'est pas nul et un phénomène de migration apparaît. L'équation d'évolution sur la fraction volumique ϕ devient

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \phi = -\nabla \cdot \left[\frac{2a^2}{9\eta} f(\phi) \nabla \cdot \Sigma^p \right] \quad (5.8)$$

23. d'où le nom du modèle.

Certains modèles plus récents aboutissent à un formalisme similaire mais dans lequel un autre tenseur joue le rôle de Σ^P (Lhuillier, 2009; Nott *et al.*, 2011).

5.1.3 Approches microscopiques

Quittons la vision macroscopique pour ce qui fait l'objet de ce travail de thèse : les approches microscopiques. Par microscopique, nous entendons que l'échelle d'intérêt est celle de quelques charges²⁴.

Il semble que les utilisateurs de ces approches microscopiques appartiennent à deux mondes relativement imperméables. D'un côté, le monde des nombres de Reynolds très faibles (écoulements de Stokes), dont fait partie la plupart des spécialistes de rhéologie des suspensions, et de l'autre, l'univers des écoulements inertiels. Et à chacun sa méthode ! Les premiers utilisent des méthodes tirant parti de la linéarité des équations de Stokes (dynamique stokésienne, méthode de couplage de force) alors que les seconds choisissent plutôt des méthodes de type simulation directe²⁵ où les équations de Navier-Stokes sont souvent résolues par des techniques usuelles de type éléments finis ou volumes finis. S'il semble évident que les approches basées sur les équations de Stokes ne se transposent pas au « monde » inertiel, l'inverse n'est pas vrai. Pour autant, à part quelques travaux ponctuels (Hwang et Hulsen, 2006; Lefebvre et Maury, 2005; Patankar et Hu, 2001; Yu et Shao, 2007) – et qui plus est, souvent limités à de simples prédictions de viscosité en bidimensionnel –, il existe peu d'incursions de la simulation directe dans la rhéologie des écoulements particuliers en régime de Stokes. Nous montrerons pourtant dans le cadre de ce travail que ces méthodes sont tout à fait à même de traiter ce type d'écoulement.

Nous dressons ici un panorama des techniques principales utilisées en débutant par les méthodes de simulation directe Navier-Stokes pour terminer par celles basées sur les équations de Stokes. Le descriptif se veut volontairement succinct mais l'idée est ici de fournir l'essence de l'approche plutôt qu'un descriptif détaillé qui pourra être trouvé au travers des références mentionnées.

Simulations ALE

Les méthodes ALE (Arbitrary Lagrange-Euler) semblent, d'un point de vue historique, être les premières simulations directes pour les écoulements particuliers puisqu'utilisées dès le début des années 1990 (Feng *et al.*, 1994; Hu, 1996; Hu *et al.*, 1992, 2001; Johnson et Tezduyar, 1996; Maury, 1999). Elles font partie de la famille des méthodes à maillage conforme aux frontières ("*boundary-fitted*"), c'est-à-dire que ce dernier « épouse » la forme des particules. Un solveur fluide usuel est utilisé mais dans un domaine à frontière mobile et dans lequel les interfaces sont les limites du domaine fluide. La Figure 5.2 montre un exemple de maillage lors de telles simulations (Lefebvre et Maury, 2005).

Ce maillage évolue donc avec le mouvement des particules, ce qui nécessite de le déformer mais aussi, le cas échéant, de remailler lorsque ce maillage devient trop déformé. Ces algorithmes à maillage mobile sont donc relativement complexes de ce fait car outre les difficultés liées au remaillage, il est nécessaire de reprojeter les grandeurs aérodynamiques à chaque nouvelle génération de maillage. Ce type de simulation est quasi-exclusivement resté cantonné au 2D du fait de la complexité et du coût calcul du 3D. A titre d'exception, on citera les travaux de Johnson et Tezduyar (1997) où des simulations à 100 particules en 3D ont été réalisées avec cette technique. Il est également inutile de souligner les problèmes numériques qu'engendrent les simulations de suspensions très concentrées, où les distances interparticulaires peuvent devenir extrêmement petites.

C'est pour cette raison que par la suite, les recherches se sont plutôt orientées vers des approches

24. On emploie quelquefois le qualificatif de mésoscopique pour désigner cette échelle.

25. DNS chez les anglo-saxons (Direct Navier-Stokes Simulations).

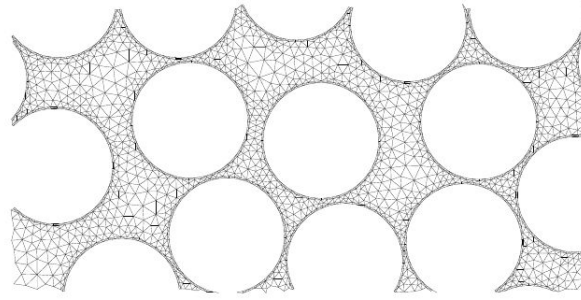


Fig. 5.2 – Exemple de maillage en simulations ALE (Lefebvre et Maury, 2005).

non-conformes où le maillage – eulérien – reste fixe et indépendant de la configuration des particules, ce qui permet de s'affranchir de la nécessité de remailler entre les charges. Cette approche possède une très grande flexibilité sans le coût calcul lié au remaillage. En contrepartie, il est nécessaire d'être capable de spécifier correctement la position de l'interface car il n'y a en effet plus de frontières bien définies entre les phases. Cela pose toutefois moins de problèmes dans le cas de particules rigides puisque leur forme n'évolue pas.

La Figure 5.3 schématise ces deux types de maillage. Toutes les méthodes de simulation directe présentées par la suite appartiennent à cette famille de maillage non-conforme aux frontières.

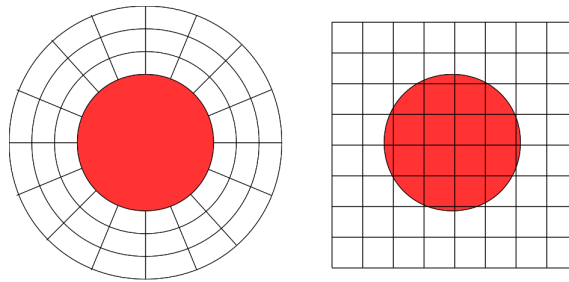


Fig. 5.3 – Maillage conforme (à gauche) et non-conforme aux frontières (à droite).

Méthode des frontières immergées ("*Immersed Boundary Method*")

La méthode des frontières immergées a été initialement utilisée dans le cadre de problèmes d'interaction fluide-structure où le mouvement de l'objet « immergé » était spécifié (par exemple une déformation élastique). Il s'agissait avant tout d'avoir une approche non-conforme sur maillage fixe (voir Figure 5.3) et donc d'être en mesure d'imposer des conditions limites à des nœuds de frontière se trouvant dans le fluide. Les premières utilisations de cette approche, développée par Peskin dans les années 1970, ont d'ailleurs été appliquées aux membranes flexibles et en particulier aux interactions fluide-structure dans les valves cardiaques (Peskin, 1977).

L'idée de base est donc de résoudre les équations de Navier-Stokes partout dans le domaine sur un maillage eulérien – fixe – et de rajouter un terme supplémentaire $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ directement dans les équations de quantité de mouvement. La densité de force \mathbf{F} appliquée au fluide est, par exemple, issue d'un problème d'élasticité. Elle est imposée aux frontières de l'objet (membrane, particule,...) qui est immergé dans le maillage fixe. Cette frontière est définie par des nœuds de calcul, lagrangiens, qui vont donc se mouvoir dans le maillage eulérien car « attachés » à l'objet immergé. A priori, ces nœuds lagrangiens ne coïncident pas avec ceux du maillage fixe et il est nécessaire d'avoir recours à une fonction Dirac régularisée δ_h pour effectuer cette interpolation et distribuer cette force sur les nœuds eulériens du maillage. En désignant par $\mathbf{X}(\mathbf{s})$ les coordonnées des nœuds de la frontière (avec

un système de coordonnées curvilignes lié à cette frontière), le terme de forçage dans les équations de Navier-Stokes est formellement défini par

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{F}(\mathbf{s}) \delta_h(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\mathbf{s})) d\mathbf{s}$$

Des variantes de la méthode originelle de Peskin existent et diffèrent principalement sur la manière d'imposer le terme de forçage. Il est ainsi possible d'appliquer ces forces volumiques sur les nœuds eulériens les plus proches de la frontière (soit dans le domaine immergé (Kim et Choi, 2006), soit dans le fluide réel (Yang et Balaras, 2006)) ou alors d'éviter de calculer explicitement une force volumique en extrapolant une vitesse à la frontière avec les nœuds eulériens environnants (méthode à cellule fantôme (Mittal et Iaccarino, 2005; Tseng et Ferziger, 2003)).

De manière naturelle, la méthode a ensuite été facilement transposée pour simuler des écoulements particuliers (Feng et Michaelides, 2005; Kim et Choi, 2006; Uhlmann, 2005). De très nombreuses autres utilisations de cette approche peuvent être trouvées dans la littérature et nous ne les reportons pas ici. L'on pourra se référer à Peskin (2002) ainsi qu'à Mittal et Iaccarino (2005) pour une description détaillée.

Méthode de domaine fictif ("*Fictitious Domain Method*")

L'essence de cette méthode consiste à « étendre » le fluide à l'intérieur des particules solides (d'où la dénomination de domaine fictif) dans le but évident d'arriver à une approche non-conforme et ainsi éviter le remaillage autour des particules. A l'intérieur de ces particules, le fluide « fictif » est contraint à posséder un mouvement de corps rigide. Dans la pratique, les équations de Navier-Stokes sont résolues partout dans le domaine, comme dans la méthode précédente des frontières immergées. D'ailleurs, comme le font remarquer de nombreux auteurs (Taira et Colonius, 2007; Wachs, 2009; Yu *et al.*, 2006), ces méthodes de domaine fictif sont au final particulièrement proches des méthodes de type frontières immergées et peuvent être vues comme une variante de ces dernières.

Dans sa version originale – dite DLM pour *Distributed Lagrange Multiplier* – Glowinski *et al.* (1999, 2001, 1998) introduisent un champ de multiplicateurs de Lagrange dont le rôle est d'imposer dans chaque particule un champ de vitesse \mathbf{u} de corps rigide, soit $\mathbf{u} = \mathbf{U} + \boldsymbol{\Omega} \wedge \mathbf{r}$ avec \mathbf{r} désignant le vecteur position par rapport au centre de gravité de la particule et \mathbf{U} et $\boldsymbol{\Omega}$ ses vitesses de translation et de rotation. Cette nouvelle variable auxiliaire joue au final le même rôle que la pression pour un écoulement incompressible, une pression qui peut justement être vue comme un multiplicateur de Lagrange permettant d'imposer un champ de vitesse à divergence nulle.

Les résultats convaincants obtenus grâce à cette approche ont rapidement motivé la mise au point de différentes variantes et améliorations. Patankar *et al.* (2000) proposent ainsi une version (dite *stress-DLM*) où l'écoulement dans la particule est contraint à posséder un champ de vitesse à déformation nulle ($\mathbf{E}[\mathbf{u}] = 0$), ce qui élimine les variables \mathbf{U} et $\boldsymbol{\Omega}$ du système et simplifie l'approche. D'autres améliorations concernent par exemple le développement d'un cadre plus général permettant la prise en compte de collisions entre particules (Singh *et al.*, 2003).

Dans tous les cas toutefois, ces méthodes présentent une certaine complexité dans leur mise en œuvre numérique (formulation faible, splittings d'opérateur) et restent assez lentes (calcul des multiplicateurs de Lagrange par procédé itératif). C'est pour pallier les limitations des méthodes d'origine que des variantes n'ayant pas recours aux multiplicateurs de Lagrange ont été développées. Patankar et ses collaborateurs (Apte *et al.*, 2009; Patankar, 2001; Sharma et Patankar, 2005) proposent ainsi une version de la "*stress-DLM*" avec une approche fractionnaire à deux pas beaucoup plus rapide et qui élimine la stratégie itérative et coûteuse des méthodes précédentes. L'idée générale

est de s'affranchir du calcul des multiplicateurs de Lagrange et de rajouter un terme de forçage dans l'équation de la quantité de mouvement. Ce terme est calculé explicitement et se base sur la conservation de l'impulsion et du moment angulaire. La méthode se prête non seulement à un formalisme de type éléments finis (comme à l'origine) mais aussi aux volumes finis ou aux différences finies. Dans le même état d'esprit, deux autres travaux ont récemment proposé des approches relativement similaires (Veeramani *et al.*, 2007; Yu et Shao, 2007). Ces études ne diffèrent au final que de manière subtile sur la façon de calculer le terme de forçage et elles restent relativement équivalentes. Ces méthodes sont particulièrement attractives puisqu'elles conservent l'intérêt de l'approche d'origine en diminuant nettement le temps calcul.

Notons pour terminer qu'il existe d'autres directions prises afin d'imposer la contrainte de rigidité sans le calcul explicite des multiplicateurs de Lagrange. C'est par exemple le cas des techniques de pénalisation (Coquerelle et Cottet, 2008; Janela *et al.*, 2005). Quand l'inertie est négligée, il est également possible de diminuer le temps de simulation en maintenant un calcul de multiplicateurs de Lagrange mais seulement sur les frontières de la particule (*Rigid-Ring Method*) (D'Avino et Hulsen, 2010).

Méthode Boltzmann sur réseau ("*Lattice Boltzmann Method*", LBM)

Les approches Boltzmann sur réseau forment une classe de techniques relativement récentes dans le monde de la mécanique des fluides et qui reçoit un intérêt grandissant (voir par exemple Chen et Doolen (2003) pour un aperçu). A l'opposé des approches classiques où les équations de Navier-Stokes sont résolues, ces techniques s'inspirent ici de la cinétique des gaz en considérant une équation de Boltzmann afin de simuler l'écoulement d'une assemblée de particules (ici au sens de molécules, à la différence de nos particules solides). Il s'agit donc d'une équation d'évolution sur une fonction de distribution $f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ sur la densité des particules.

Ces méthodes se sont initialement inspirées des automates cellulaires, qui sont des approches informatiques pour les systèmes dynamiques discrets (Hardy *et al.*, 1973). Une des particularités est ainsi de travailler dans un espace vitesses-coordonnées discrétisé par un réseau, la plupart du temps cubique (3D) ou carré (2D). Chaque nœud de ce réseau représente une position possible et chacun de ces nœuds est connecté par une vitesse possible. A chaque itération, ces particules de fluide se déplacent en « sautant » de proche en proche sur les sites voisins où elles peuvent entrer en collision avec d'autres particules selon des lois spécifiques. Les particules ne se déplacent que sur les nœuds du réseau, ce qui signifie qu'il y a un jeu discret de vitesses possibles. Avec des topologies de réseau et des lois de collision adaptées, il est possible de montrer que l'assemblée de particules possède le comportement d'un fluide visqueux compressible.

Cette méthode a ensuite été adaptée aux écoulements particuliers (Ladd, 1994a,b; Ladd et Verberg, 2001). Afin d'imposer la condition de non-glissement à l'interface fluide/solide, une condition de rebond des particules à l'interface ("*bounce-back rule*") est utilisée.

Un des intérêts d'une telle approche semble être sa rapidité et sa facilité de parallélisation dans la mesure où il n'y a aucun système linéaire à inverser. Un des désavantages est par contre que le fluide modélisé est nécessairement compressible, ce qui peut être pénalisant pour traiter un écoulement incompressible (les pas de temps restant petits car imposés par l'acoustique).

Dynamique stokésienne ("*Stokesian dynamics*", SD)

Comme son nom le laisse supposer, nous entrons avec ces méthodes dans le monde des écoulements de Stokes ($Re \rightarrow 0$).

La dynamique stokésienne présente une particularité remarquable : c'est avec cette approche qu'a été obtenue la quasi-totalité des résultats concernant la physique des suspensions, grâce en

particulier aux travaux de Brady et collaborateurs. La dynamique stokésienne a été proposée il y a maintenant trente ans (Bossis et Brady, 1984; Brady et Bossis, 1985, 1988; Durlofsky *et al.*, 1987) et est toujours largement utilisée. L'idée centrale est de tirer avantage de la linéarité des équations de Stokes et ainsi calculer les interactions hydrodynamiques à longue portée par un développement en multipôles et celles à courte portée par une contribution des forces de lubrification.

Cette méthode s'apparente à de la dynamique moléculaire, dans laquelle il s'agit de suivre l'évolution d'un système de N_p particules, en résolvant une équation de Langevin :

$$\mathbf{M} \frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{F}^H + \mathbf{F}^B + \mathbf{F}^P$$

où \mathbf{U} est le vecteur des vitesses de translation/rotation (de dimension $6N_p$) et \mathbf{M} une matrice de masse/moment d'inertie ($6N_p \times 6N_p$). Le second membre regroupe les forces/moments hydrodynamiques (\mathbf{F}^H), les efforts stochastiques dus au mouvement brownien (\mathbf{F}^B) ainsi que les forces non-hydrodynamiques \mathbf{F}^P (collisions, forces extérieures,...). Dans la limite d'un nombre de Reynolds tendant vers zéro, la force hydrodynamique peut s'écrire (Bossis et Brady, 1984) :

$$\mathbf{F}^H = -\mathcal{R}_{FU} \cdot (\mathbf{U} - \mathbf{u}^\infty) + \mathcal{R}_{FE} : \mathbf{E}^\infty$$

pour un champ de vitesse fluide $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x})$ et taux de déformation \mathbf{E}^∞ extérieurs imposés. Dans cette équation, \mathcal{R}_{FU} et \mathcal{R}_{FE} sont des matrices, dites de résistance, permettant de calculer la force dès lors que la vitesse est connue. Ces matrices dépendent de la configuration (position et orientation) des particules. Le problème inverse donne lieu à des matrices de mobilité (elles permettent de calculer la vitesse si la force est connue).

Toute la méthode consiste à calculer ces matrices de passage. Concernant les interactions à longue portée, l'idée est de partir d'une solution générale et exacte des équations de Stokes en utilisant une fonction de Green $\mathcal{G}(\mathbf{x})$. Cette solution est ensuite développée en multipôles et permet d'obtenir une expression de la vitesse du fluide \mathbf{u} en tout point (Durlofsky *et al.*, 1987; Guazzelli *et al.*, 2011; Kim et Karrila, 1991)

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}) &= \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \int_S \frac{\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{8\pi\eta} \boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{x}') \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}') dS(\mathbf{x}') \\ &\approx \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) - \frac{\mathcal{G}(\mathbf{x})}{8\pi\eta} \mathbf{F}(\mathbf{x}) + \frac{1}{8\pi\eta} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{D}(\mathbf{x}) + \dots \end{aligned} \quad (5.9)$$

Dans l'expression précédente, seuls les deux premiers termes du développement sont présentés. Ces termes incluent les différents moments de la force surfacique $\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n}$ qu'exerce le fluide sur la particule. Le premier terme (appelé monopôle ou *stokeslet*) est ainsi directement lié à la force \mathbf{F} appliquée au fluide et due à la présence de la particule (inertie, gravité ou forces extérieures). Le second terme (dipôle) implique un tenseur \mathbf{D} dont la partie symétrique (*stresslet*) contribue à imposer un taux de déformation nul dans la particule et la partie antisymétrique (*rotlet*) est liée au couple extérieur appliqué à la particule.

Une dernière étape consiste à invoquer les formules de Faxén qui permettent d'estimer la force et le couple s'exerçant sur une particule en fonction de sa vitesse de translation et rotation. Ces relations, écrites pour chaque particule et combinées avec Eq. (5.9), permettent de construire les matrices de mobilité et, par inversion, les matrices de résistance recherchées. Les forces de lubrification sont également adjointes sous la forme d'une matrice de résistance additionnelle. Le détail complet de la procédure se trouve dans les références citées.

Jusqu'aux années 2000, les simulations de dynamique stokésienne sont bidimensionnelles (plus précisément une monocouche de particules sphériques) et très limitées en nombre de particules (quelques dizaines). Cette limite provient d'un coût calcul important de la méthode en $\mathcal{O}(N_p^3)$, avec

N_p le nombre de particules, qui est lié à l'inversion de la matrice de mobilité. Des travaux plus récents ont permis de réduire cette complexité en $\mathcal{O}(N_p \log N_p)$ en s'affranchissant du calcul direct de la matrice de résistance par une estimation des forces hydrodynamiques de manière itérative (Sierou et Brady, 2001). Ce gain substantiel a permis de réaliser des simulations tridimensionnelles de suspensions et comportant jusqu'à 2000 particules (Sierou et Brady, 2001, 2002)

Méthode de couplage de force ("*Force Coupling Method*", FCM)

Chaque particule est ici physiquement représentée par un terme de forçage (force volumique) $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$ rajouté aux équations de Stokes :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ 0 &= -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)\end{aligned}$$

Dans l'esprit de la dynamique stokésienne précédemment présentée, l'idée est d'estimer ce terme de forçage, induit par la présence des particules, en ayant recours à une décomposition multipolaire des solutions de l'équation de Stokes (par exemple Durlofsky *et al.* (1987)). Ces termes de forçage sont distribués spatialement sur des enveloppes gaussiennes de taille finie $\Delta(\mathbf{x})$ fonction du rayon de la particule. Le développement du terme de forçage s'écrit alors pour N_p particules localisées en \mathbf{x}_0 (Maxey et Patel, 2001) :

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=1}^{N_p} [\mathbf{F}^n \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0^n(t)) + \mathbf{G}^n \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0^n(t))] \quad (5.10)$$

pour les deux premiers termes (qui sont ceux utilisés en pratique). Il s'agit ni plus ni moins des équations déjà abordées dans la section précédente Eq. (5.9).

L'équation de Stokes et son terme de force volumique sont alors ensuite résolus classiquement. Plus de précisions sur cette méthode pourront être trouvées dans Lomholt et Maxey (2003); Lomholt *et al.* (2002); Maxey et Patel (2001).

Notons enfin que cette méthode a, de manière récente, été largement utilisée dans le domaine de la rhéologie des suspensions (Abbas, 2008; Abbas *et al.*, 2006; Climent et Maxey, 2003; Yeo et Maxey, 2010b,c).

Et les autres....

Il serait présomptueux de prétendre avoir dressé une liste exhaustive des méthodes existantes. Nous pensons toutefois que celles qui ont été présentées précédemment représentent la grande majorité des techniques utilisées dans la littérature dans le domaine de la simulation des écoulements particuliers. D'autres méthodes existent bien évidemment, certaines ne sont sans doute même pas à notre connaissance...

Par souci d'exhaustivité, nous reportons ici les quelques méthodes recensées n'appartenant pas à la liste précédente.

Dans le domaine de la simulation directe, ce sont souvent des variantes des méthodes déjà présentées. Il existe ainsi des approches de type "*fictitious boundaries*" (Wan et Turek, 2006, 2007) où l'on calcule explicitement les forces hydrodynamiques à la surface des particules puis les vitesses de translation et rotation. La vitesse obtenue est imposée directement dans le maillage eulérien. Récemment, d'autres approches de type simulation directe ont été proposées avec un traitement spécifique de l'interface dans lequel la vitesse fluide au voisinage de cette dernière est obtenue en raccordant une solution approchée des équations de Stokes (Perrin et Hu, 2008).

Il existe également une panoplie de techniques d'approximation des équations de Stokes dont une grande partie est abordée dans le livre de Kim et Karrila (1991) comme les méthodes de

collocation ou d'éléments de frontière (*Boundary Element Method*). Il en existe plusieurs variantes (que nous ne détaillerons pas ici) qui fournissent quelques résultats dans le domaine des suspensions (Mammoli, 2002; Nasser *et al.*, 2000; Phan-Thien *et al.*, 2006). Elles restent toutefois très coûteuses pour les écoulements tridimensionnels.

Pour terminer enfin, citons la dynamique particulaire dissipative (*Dissipative Particle Dynamics* ou DPD) (Koelman et Hoogerbrugge, 1993; Moeendarbary *et al.*, 2010). Cette approche récente et prometteuse peut être vue comme un type de dynamique moléculaire dans le sens où l'on résout les équations de Newton Eq. (5.1). Mais ces lois ne s'appliquent plus à des particules élémentaires (au sens des molécules du fluide) mais, plus macroscopiquement, à des « morceaux » de fluide (qualifiés toutefois dans cette méthode de « DPD-particules », encore une fois à ne pas confondre avec nos particules solides). Ces DPD-particules sont soumises à des forces dissipatives, conservatives et stochastiques dont les caractéristiques permettent au final de représenter les équations de Navier-Stokes. Cette technique peut d'ailleurs également être considérée comme une classe de formulation lagrangienne des équations de Navier-Stokes. La prise en compte d'un mouvement de corps rigide, pour modéliser des particules solides, est obtenue en imposant à certaines DPD-particules de conserver des positions relatives fixées. Cette technique semble relativement flexible et adaptée pour la rhéologie des suspensions (Li et Drazer, 2008; Martys, 2005).

5.2 Critères de choix et approche retenue

Choisir une méthode est toujours délicat. Ce choix répond évidemment à des critères objectifs conditionnés par l'usage que l'on souhaite faire de la simulation (régimes d'écoulement, forme des particules,...) mais aussi par d'autres, plus subjectifs (historiques, culturels,...). La difficulté de l'épreuve est souvent renforcée par l'abondante bibliographie, chaque article proposant une approche semblant plus performante que la précédente !

Dans l'optique de ce travail, nous cherchons à développer une méthode qui soit la plus générale possible. Même si la plupart des résultats présentés dans ce manuscrit concerneront des écoulements de particules sphériques en régime de Stokes dans un fluide newtonien, aucun écoulement de propergol n'appartient réellement à ce cadre. La méthode choisie doit donc pouvoir facilement s'étendre aux cas de particules de forme quelconque avec des régimes d'écoulement qui peuvent être inertiels et dans un fluide porteur qui peut ne pas être newtonien.

La considération d'écoulements inertiels exclut d'emblée les approches basées sur les équations de Stokes (dynamique stokésienne, FCM) qui ne sont théoriquement pas transposables à ces régimes de part leur fondement même. Seules les approches par simulation directe peuvent donc en principe convenir. La rhéologie des suspensions particulières en régime inertiel n'a toutefois été que très peu abordée et seuls quelques résultats sont disponibles, principalement par des approches de type domaine fictif (Patankar et Hu, 2002; Yu et Shao, 2007). Notons toutefois qu'en régime faiblement inertiel, des approches de type FCM peuvent convenir (Liu *et al.*, 2009).

Soulignons également que la dynamique stokésienne souffre d'une certaine difficulté à traiter tout type d'écoulement. Comme l'écoulement de base est prescrit, il est difficile de considérer des configurations où l'écoulement est dominé par les conditions limites. L'implémentation de conditions limites spécifiques pose en effet problème et de simples parois solides, par exemple, sont généralement modélisées par un alignement de particules fixes, ce qui n'est pas sans induire quelques difficultés dans l'interprétation des résultats (Nott et Brady, 1994; Singh et Nott, 2000).

En ce qui concerne la forme des particules, toutes les méthodes de simulation directe sont techniquement à même de traiter des formes quelconques même si l'implémentation peut être plus ou moins aisée selon les méthodes. Pour autant, l'on notera très peu de travaux sur des particules

non-sphériques dans le domaine de la rhéologie numérique. Il existe certes des simulations pour des écoulements de particules de forme diverse comme des ellipsoïdes (Yu et Shao, 2007), des particules cubiques (Apte *et al.*, 2009) ou polygonales (Wachs, 2009) ou encore des fibres (Beaume, 2008) mais très peu de ces travaux abordent l'aspect rhéologique.

Encore une fois, les approches basées sur les équations de Stokes sont très difficilement transposables à des formes quelconques car il est nécessaire de connaître le développement multipolaire et les lois de Faxén pour un objet de forme arbitraire. A notre connaissance, seuls des ellipsoïdes ont été traités via la dynamique stokésienne (Claeys et Brady, 1993) et la FCM (Liu *et al.*, 2009).

De la même manière, la prise en compte d'une loi quelconque pour le comportement rhéologique du fluide porteur ne peut se faire que par des approches générales de type simulation directe. Les méthodes de type domaine fictif, en particulier, semblent les seules approches microscopiques recensées dans la littérature abordant les écoulements particuliers dans des fluides non-newtoniens. Il s'agit principalement d'un fluide viscoélastique d'Oldroyd-B (Hwang et Hulsen, 2006; Hwang *et al.*, 2004; Patankar et Hu, 2001; Yu *et al.*, 2002) ou rhéofluidifiant (Yu *et al.*, 2006).

Au vu de cette analyse, notre choix s'est porté sur une approche de type domaine fictif. Pour limiter le temps calcul, il semble judicieux de considérer des versions sans multiplicateurs de Lagrange comme celles proposées par Veeramani *et al.* (2007); Yu et Shao (2007) et Apte *et al.* (2009). Comme nous l'avons déjà souligné, ces trois variantes sont en réalité très proches (leurs différences seront abordées plus tard dans la description de la méthode). Les approches qui viennent d'être citées offrent également un avantage intéressant : elles sont écrites en formulation forte et traitées par différences finies ou volumes finis. Ces techniques sont généralement plus simples à mettre en œuvre que les éléments finis par exemple. Dans la mesure où seront traitées des configurations académiques plutôt qu'industrielles, les domaines de calcul seront très simples, ce qui légitime un maillage structuré cartésien (pavage régulier et ordonné). Dans ce cas, les différences finies s'offrent comme un choix privilégié en termes de rapidité et simplicité de mise en œuvre.

En conclusion, notre choix se porte donc sur une méthode de domaine fictif sans multiplicateurs de Lagrange, de type Yu et Shao (2007), sur maillage cartésien avec une discrétisation par différences finies. Dans la mesure où ce travail de rhéologie numérique cherche à s'approcher au mieux de la réalité physique, une approche 3D sera privilégiée.

DESCRIPTION DU MODÈLE NUMÉRIQUE

Sommaire

6.1	Formulation mathématique	73
6.2	Formulation numérique	76
6.2.1	Sous-problème fluide	77
6.2.2	Sous-problème particule	80
6.3	Suivi et déplacement des particules	82
6.3.1	Suivi des particules	82
6.3.2	Déplacement des particules	84
6.3.3	Transport du terme de forçage	84
6.3.4	Calcul des grandeurs rhéologiques	86
6.4	Conditions limites	87
6.5	Forces de lubrification	88
6.5.1	Origine	89
6.5.2	Modélisation : état de l'art	90
6.5.3	Un peu de théorie	91
6.5.4	Modélisation par décomposition de la matrice de résistance	94
6.6	Forces de contact	99
6.6.1	Modélisation : petit tour bibliographique	99
6.6.2	Méthode des éléments discrets (DEM)	100
6.6.3	Choix des paramètres physiques du modèle DEM	102
6.6.4	Aspects numériques	104
6.7	Le code MrProp	105
6.7.1	Performances	105
6.7.2	Stokes ou Navier-Stokes ?	105
6.7.3	Résumé des étapes	107

6.1 Formulation mathématique

Soit \mathcal{D} le domaine de calcul incluant le domaine fluide \mathcal{D}_f et le domaine des particules \mathcal{D}_p avec $\mathcal{D} = \mathcal{D}_f \oplus \mathcal{D}_p$. Le domaine particulaire est supposé constitué de N_p particules \mathcal{P}_i , soit $\mathcal{D}_p = \bigcup_{i=1}^{N_p} \mathcal{P}_i$ (cf. Figure 6.1).

Dans le cadre de ce travail, les particules seront supposées sphériques, rigides et homogènes de masse volumique ρ_p . La frontière commune entre fluide et particules sera notée $\partial\mathcal{D}$.

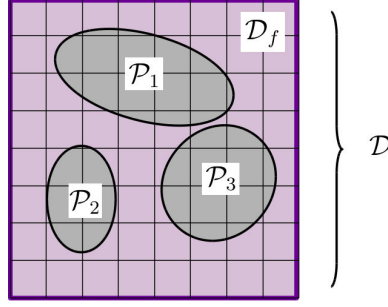


Fig. 6.1 – Schéma du domaine de calcul (avec $N_p=3$).

L'idée de la méthode du domaine fictif est, rappelons-le, d'étendre les équations de Navier-Stokes dans tout le domaine \mathcal{D} , y compris donc dans les particules. Ces dernières sont ainsi supposées « remplies » d'un fluide fictif de mêmes propriétés que le fluide porteur qui sera supposé newtonien, incompressible et de masse volumique ρ_f et viscosité η . Un traitement spécifique est ensuite introduit pour imposer à ce fluide fictif un mouvement de corps rigide. La méthode qui va être décrite s'inspire fortement de Yu et Shao (2007).

La condition d'incompressibilité impose que le vecteur vitesse \mathbf{u} du fluide soit solénoïdal **dans tout le domaine** \mathcal{D}

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6.1)$$

La conservation de la quantité de mouvement s'écrit **dans tout le domaine** \mathcal{D} :

$$\rho_f \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \rho_f \boldsymbol{\lambda} \quad (6.2)$$

où $\boldsymbol{\lambda}$ est un terme de forçage permettant d'assurer un mouvement de corps rigide pour les particules. La quantité $\rho_f \boldsymbol{\lambda}$ peut être vue comme une pseudo-force volumique. Il en découle que $\boldsymbol{\lambda}$ est non-nul dans le domaine particulaire \mathcal{D}_p et nul dans le domaine fluide \mathcal{D}_f .

Le tenseur $\boldsymbol{\Sigma}$ est le tenseur des contraintes du fluide et s'écrit dans le cas newtonien :

$$\boldsymbol{\Sigma} = -p\mathbf{I} + 2\eta\mathbf{E} \quad (6.3)$$

avec p la pression et \mathbf{E} le tenseur du taux de déformation $\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$.

Dans Eq. (6.2), les éventuelles forces de gravité ne sont pas prises en compte à ce stade puisque tout le domaine \mathcal{D} est composé d'un fluide de même masse volumique ρ_f . Ces forces seront intégrées ultérieurement lors du calcul de la vitesse des particules.

Les particules sont supposées rigides, c'est-à-dire que le champ de vitesse à l'intérieur de chacune d'entre elles a un taux de déformation nul, soit $\mathbf{E}[\mathbf{u}] = 0$. Il est possible de démontrer mathématiquement (Lefebvre, 2007b) que cette condition est strictement équivalente à l'existence de deux vecteurs \mathbf{U} (vitesse de translation) et $\boldsymbol{\Omega}$ (vitesse de rotation) telle que le champ de vitesse dans une particule \mathcal{P} s'écrit

$$\mathbf{u} = \mathbf{U} + \boldsymbol{\Omega} \wedge \mathbf{r} \quad (6.4)$$

avec \mathbf{r} désignant le vecteur position par rapport au centre de gravité de la particule : $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_G$. Un mouvement de corps rigide est ainsi composé d'une translation du centre de gravité et d'une rotation autour de ce dernier.

Les développements qui vont maintenant suivre ont pour objectif de construire des relations explicites permettant de calculer le terme de forçage λ .

Le mouvement de chacune des particules \mathcal{P} est gouverné par les équations de Newton, soit :

$$M \frac{d\mathbf{U}}{dt} = \mathbf{F}^h + \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p}\right) M \mathbf{g} + \mathbf{F}^c \quad (6.5)$$

$$\frac{d(\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\Omega})}{dt} = \mathbf{T}^h + \mathbf{T}^c \quad (6.6)$$

où \mathbf{g} est le vecteur d'accélération lié à la gravité et les vecteurs \mathbf{F}^h et \mathbf{T}^h sont respectivement la force et le moment hydrodynamique s'appliquant sur la particule \mathcal{P} tandis que \mathbf{F}^c et \mathbf{T}^c représentent les forces et couples liés à des interactions entre particules. Dans le cadre de ce travail, ces dernières décriront essentiellement le contact entre particules mais elles peuvent également traduire toute autre action extérieure comme des forces électrostatiques par exemple. Les efforts hydrodynamiques sont formellement définis par

$$\mathbf{F}^h = \int_{\partial\mathcal{P}} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} dS \quad (6.7)$$

$$\mathbf{T}^h = \int_{\partial\mathcal{P}} \mathbf{r} \wedge (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma}) dS \quad (6.8)$$

avec \mathbf{n} le vecteur normal (sortant) à la surface particule.

Dans Eq. (6.5) et Eq. (6.6), M et \mathbf{J} désignent la masse et le tenseur de moment d'inertie de la particule qui s'écrivent par définition :

$$M = \int_{\mathcal{P}} \rho d\mathbf{x} \quad (6.9)$$

$$\mathbf{J} = \int_{\mathcal{P}} \rho [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{I} - \mathbf{r} \otimes \mathbf{r}] d\mathbf{x} \quad (6.10)$$

L'évaluation de ces intégrales (ainsi que d'autres grandeurs utilisées par la suite) est grandement simplifiée par l'utilisation d'une masse volumique généralisée $\rho(\mathbf{x})$ définie par :

$$\rho(\mathbf{x}) = \rho_f (1 - \mathcal{I}_{\mathcal{P}}(\mathbf{x})) + \rho_p \mathcal{I}_{\mathcal{P}}(\mathbf{x}) \quad (6.11)$$

où $\mathcal{I}_{\mathcal{P}}(\mathbf{x})$ est la fonction indicatrice d'une particule :

$$\mathcal{I}_{\mathcal{P}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in \mathcal{P} \\ 0 & \text{si } \mathbf{x} \notin \mathcal{P} \end{cases} \quad (6.12)$$

En intégrant la conservation de la quantité de mouvement Eq. (6.2) et $\mathbf{r} \wedge$ Eq. (6.2) sur le volume d'une particule \mathcal{P} et en utilisant la condition de corps rigide Eq. (6.4) et la définition des efforts hydrodynamiques Eq. (6.7) et Eq. (6.8), nous obtenons :

$$\mathbf{F}^h = -\rho_f \int_{\mathcal{P}} \lambda d\mathbf{x} + \frac{\rho_f}{\rho_p} M \frac{d\mathbf{U}}{dt} \quad (6.13)$$

$$\mathbf{T}^h = -\rho_f \int_{\mathcal{P}} \mathbf{r} \wedge \lambda d\mathbf{x} + \frac{\rho_f}{\rho_p} \frac{d(\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\Omega})}{dt} \quad (6.14)$$

La connaissance explicite de ces efforts n'est généralement pas nécessaire et seules des informations sur la pseudo-force $\boldsymbol{\lambda}$ sont recherchées. En réinjectant Eq. (6.13) dans Eq. (6.5) et Eq. (6.14) dans Eq. (6.6), nous obtenons alors les relations suivantes sur $\boldsymbol{\lambda}$ et son moment :

$$\rho_f \int_{\mathcal{D}} \boldsymbol{\lambda} \, d\mathbf{x} = \frac{(\rho_f - \rho_p)}{\rho_p} M \left[\frac{d\mathbf{U}}{dt} - \mathbf{g} \right] + \mathbf{F}^c \quad (6.15)$$

$$\rho_f \int_{\mathcal{D}} \mathbf{r} \wedge \boldsymbol{\lambda} \, d\mathbf{x} = \frac{(\rho_f - \rho_p)}{\rho_p} \left[\frac{d(\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\Omega})}{dt} \right] + \mathbf{T}^c \quad (6.16)$$

A propos du tenseur d'inertie et de Eq. (6.16), nous rappelons le développement :

$$\frac{d(\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\Omega})}{dt} = \mathbf{J} \cdot \frac{d\boldsymbol{\Omega}}{dt} + \boldsymbol{\Omega} \wedge (\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \quad (6.17)$$

avec un terme de droite supplémentaire non nul en 3D dans le cas général (sauf dans le cas particulier de sphères).

En résumé, le problème est gouverné par le système d'équations suivantes à résoudre :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho_f} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \boldsymbol{\lambda} \quad \text{dans } \mathcal{D} \quad (6.18)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } \mathcal{D} \quad (6.19)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{U} + \boldsymbol{\Omega} \wedge \mathbf{r} \quad \text{dans } \mathcal{D}_p \quad (6.20)$$

$$\rho_f \int_{\mathcal{D}} \boldsymbol{\lambda} \, d\mathbf{x} = \frac{(\rho_f - \rho_p)}{\rho_p} M \left[\frac{d\mathbf{U}}{dt} - \mathbf{g} \right] + \mathbf{F}^c \quad (6.21)$$

$$\rho_f \int_{\mathcal{D}} \mathbf{r} \wedge \boldsymbol{\lambda} \, d\mathbf{x} = \frac{(\rho_f - \rho_p)}{\rho_p} \left[\frac{d(\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\Omega})}{dt} \right] + \mathbf{T}^c \quad (6.22)$$

avec $\nu = \eta / \rho_f$ la viscosité cinématique du fluide.

6.2 Formulation numérique

Nous présentons ici la méthode de résolution numérique du système précédent. Ce problème peut être découplé en deux sous-problèmes. Le premier, formé par Eq. (6.18) et Eq. (6.19), est un sous-problème fluide puisque dans cette approche par domaine fictif, les particules sont traitées comme du fluide porteur. Le second sous-problème, donné par Eq. (6.20) à Eq. (6.22), est particulaire et consiste essentiellement à imposer la contrainte de corps rigide aux particules. Ce découplage, qui facilite grandement la résolution, est utilisé dans la totalité des travaux ayant recours aux domaines fictifs.

Les développements numériques qui vont être présentés s'appuient grandement sur les travaux de Yu et Shao (2007) et Apte *et al.* (2009) pour tout ce qui concerne la prise en compte de la pseudo-force $\boldsymbol{\lambda}$. Les choix concernant purement les techniques d'intégration des équations résultent par contre de stratégies personnelles et peuvent différer des travaux cités.

La notion de dimension (2D vs. 3D) joue un rôle profond en mécanique des fluides et tout particulièrement dans les écoulements particuliers. Afin de s'approcher au plus près de la réalité physique, il est nécessaire de privilégier une approche complètement 3D, un choix certes plus coûteux mais indispensable pour espérer obtenir des résultats quantitatifs et applicables. Tout le développement numérique qui va suivre suppose un raisonnement en trois dimensions.

6.2.1 Sous-problème fluide

Nous exposons ici la méthode retenue pour résoudre l'écoulement fluide.

La résolution des équations de Navier-Stokes est effectuée par une technique de différences finies sur maillage structuré cartésien. Le domaine de calcul \mathcal{D} est supposé parallélépipédique de dimension $(L_x \times L_y \times L_z)$ et discrétisé en $(N_x \times N_y \times N_z)$ points de calcul de manière uniforme (Figure 6.2). La taille des mailles est donc constante par dimension et vaut $\Delta_i = L_i / (N_i - 1)$. Dans la plupart des cas, l'absence de directions privilégiées justifie de choisir une résolution identique dans les trois directions et l'on notera sans ambiguïté Δ la taille de la maille.

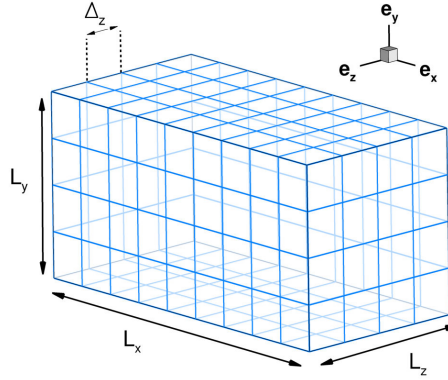


Fig. 6.2 – Schéma du domaine de calcul.

Classiquement pour les équations incompressibles, le maillage choisi est de type décalé ("staggered") appelé aussi maillage MAC (Marker-And-Cell (Harlow *et al.*, 1965)). Dans ce type de maillage, la pression p est évaluée au centre de l'élément et les composantes de la vitesse \mathbf{u} aux faces, comme illustré sur la Figure 6.3 en 2D pour plus de clarté. Le cas 3D est identique : si la pression est calculée au centre de l'élément (i, j, k) , alors les vitesses u, v, w sont respectivement calculées en $(i \pm 1/2, j, k)$, $(i, j \pm 1/2, k)$ et $(i, j, k \pm 1/2)$. Ce type de maillage évite par construction les phénomènes de découplage vitesse-pression qui induisent des instabilités numériques.

Une remarque importante est que nous avons également fait le choix d'imposer ce décalage au champ de force λ : ses composantes sont décentrées de la même façon que pour la vitesse. Même si ce choix n'est pas motivé par des raisons de stabilité et que les études répertoriées ne le spécifient pas, cette option s'avère naturelle puisque ce terme est directement relié à la vitesse.

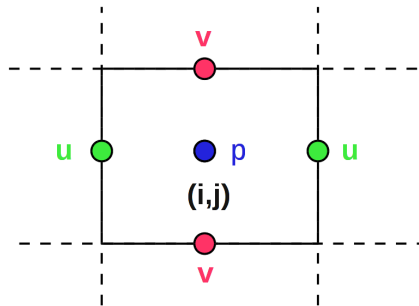


Fig. 6.3 – Maillage décalé (en 2D).

Nous nous intéressons principalement dans le cadre de ce travail à des écoulements à nombre de Reynolds très faible ou, dit autrement, à des écoulements où les effets visqueux sont prépondérants par rapport aux effets inertiels. Le temps caractéristique de diffusion $\tau_d \sim \Delta^2 / \nu$ (avec $\nu = \eta / \rho_f$) est

très petit devant le temps caractéristique de convection $\tau_c \sim \Delta/|\mathbf{u}|$. Ainsi, et afin d'éviter des pas de temps de calcul Δt prohibitivement petits (de l'ordre de τ_d pour assurer la stabilité numérique), il est judicieux de considérer une intégration temporelle implicite des termes visqueux alors qu'une intégration temporelle explicite des termes convectifs suffira.

Pour l'intégration temporelle des termes convectifs, nous choisissons un schéma d'Adams-Bashforth explicite d'ordre 2 en temps tandis que les termes diffusifs seront estimés par un schéma temporel implicite d'ordre 2 de type Crank-Nicolson.

Le système initial Eq. (6.18) et Eq. (6.19) discrétisé s'écrit ainsi avec ce choix de schéma²⁶ (et pour l'itération n) :

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \left[\frac{3}{2}(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^n - \frac{1}{2}(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n-1} \right] + \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho_f} = \frac{\nu}{2} \nabla^2 (\mathbf{u}^{n+1} + \mathbf{u}^n) + \boldsymbol{\lambda}^n \quad (6.23)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad (6.24)$$

Dans ces équations apparaît déjà la philosophie des méthodes de domaine fictif sans multiplicateurs de Lagrange telles que celles déjà citées (Apte *et al.*, 2009; Yu et Shao, 2007). L'évaluation du terme de forçage $\boldsymbol{\lambda}$ n'est pas issue d'un calcul de minimisation (généralement un problème de point-selle résolu par un algorithme itératif d'Uzawa) comme dans la méthode d'origine (Glowinski *et al.*, 1999, 2001, 1998) mais il est ici pris à l'itération courante n . Il s'agit donc, à cette étape du calcul, d'une imposition de corps rigide approchée dans le sens où la valeur de $\boldsymbol{\lambda}^{n+1}$, encore inconnue à ce stade, n'est pas utilisée.

Le gros du travail pour ce sous-problème fluide consiste donc à résoudre ce système Eq. (6.23) et Eq. (6.24) afin de calculer les nouvelles vitesses \mathbf{u}^{n+1} et pression p^{n+1} . Nous choisissons une **méthode de projection**, développée indépendamment par l'américain Chorin (1968) et le français Temam (1968), et classiquement utilisée pour ce type de problème. Le cœur théorique de cette approche s'appuie sur la décomposition de Helmholtz-Hodge qui stipule qu'un vecteur \mathbf{u} s'écrit comme la somme d'une partie solénoïdale (à divergence nulle) et d'une partie irrotationnelle (à rotationnel nul, et donc dérivant d'un potentiel scalaire). Concrètement, l'idée est de calculer dans un premier temps un champ de vitesse qui ne remplit pas la condition d'incompressibilité puis d'utiliser la pression afin d'imposer cette contrainte. Pour les écoulements incompressibles, la pression peut en effet être vue comme un multiplicateur de Lagrange permettant d'assurer la conservation de la masse.

La méthode se décompose en trois étapes :

1. Etape de prédiction

Lors de cette première étape, la conservation de la quantité de mouvement Eq. (6.23) est résolue mais sans prendre en compte le terme de pression, ce qui conduit alors à l'équation d'advection-diffusion suivante :

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \left[\frac{3}{2}(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^n - \frac{1}{2}(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n-1} \right] = \frac{\nu}{2} \nabla^2 (\mathbf{u}^* + \mathbf{u}^n) + \boldsymbol{\lambda}^n \quad (6.25)$$

La solution est une vitesse, notée \mathbf{u}^* , ne vérifiant pas la condition d'incompressibilité ($\nabla \cdot \mathbf{u}^* \neq 0$)

2. Etape de projection

Cette projection conduit à l'équation suivante sur \mathbf{u}^*

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\rho_f} \nabla p^{n+1} \quad (6.26)$$

26. A ceux qui trouveraient cette partie quelque peu sibylline, l'annexe A revient sur certains aspects numériques qui éclaireront ce passage...

Nous noterons au passage qu'il s'agit de la décomposition de Helmholtz-Hodge de la vitesse \mathbf{u}^* . La vitesse \mathbf{u}^{n+1} recherchée doit respecter la condition d'incompressibilité ($\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$). En prenant la divergence de Eq. (6.26), l'équation de Poisson suivante sur la pression est obtenue :

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{\rho_f}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (6.27)$$

3. Etape de correction

La résolution du système linéaire précédent Eq. (6.27) fournit le champ de pression p^{n+1} . En appliquant Eq. (6.26), il devient possible de déterminer la vitesse recherchée \mathbf{u}^{n+1} vérifiant maintenant la condition d'incompressibilité :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho_f} \nabla p^{n+1} \quad (6.28)$$

A l'issue des ces trois étapes, le sous-problème fluide est résolu et les vitesses et pression à l'itération $n+1$ sont calculées.

Discretisation spatiale

La discrétisation spatiale des opérateurs de gradient ou de laplacien intervenant dans les équations précédentes est extrêmement simple en formulation différences finies sur maillage structuré (ce qui fait un des intérêts de ce choix). Les gradients sont calculés en centré à l'ordre 2 et s'écrivent de manière générique en 1D (et en prenant en compte l'aspect décalé du maillage) :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{u_{i+\frac{3}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{2\Delta}$$

De même, la dérivée seconde pour cette même grandeur s'écrit :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i+\frac{1}{2},j,k} \approx \frac{u_{i+\frac{3}{2},j,k} - 2u_{i+\frac{1}{2},j,k} + u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta^2}$$

La discrétisation pour les autres variables se fait de manière identique. L'on rappellera seulement que comme la pression est calculée au centre des éléments, sa discrétisation s'écrit avec la molécule $(i+1, i, i-1)$. De même, l'extension au cas multidimensionnel (2D ou 3D) est triviale.

Résolution des systèmes linéaires

Du fait de l'approche implicite, l'étape de convection-diffusion Eq. (6.25) conduit à un système linéaire à résoudre sur la variable \mathbf{u}^* (puisque cette dernière apparaît aussi dans le laplacien). Plus précisément, il s'agit de trois systèmes, découplés, pour chacune des composantes de la vitesse $\mathbf{u}^* = (u^*, v^*, w^*)$. De manière analogue, l'équation de Poisson Eq. (6.27) mène elle aussi à un système linéaire à résoudre sur p^{n+1} .

Ces quatre systèmes linéaires peuvent formellement s'écrire sous la forme $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ où \mathbf{x} est le vecteur des inconnues (par exemple, les $p_{i,j,k}^{n+1}$ dans le problème de Poisson) et \mathbf{b} est le vecteur du second membre (dimension $N_x N_y N_z$). Pour les problèmes traités ici, la matrice \mathbf{A} est toujours symétrique, définie, positive et de dimension $(N_x N_y N_z)^2$.

La majeure partie du temps calcul nécessaire à résoudre le sous-problème fluide réside justement

dans l'inversion de ces systèmes, ce qui justifie de choisir des méthodes adaptées. En particulier, les matrices \mathbf{A} sont creuses, ce qui légitime l'usage de techniques itératives au détriment des méthodes directes, très coûteuses. Nous avons codé et testé différentes approches²⁷ : des méthodes « ancestrales » (Jacobi) aux plus répandues (gradient conjugué avec différents préconditionnements). Notre choix s'est porté sur les méthodes, récentes, de type multigrille qui nous ont semblé, parmi nos différents tests, les plus rapides et adaptées au problème. Ces méthodes ont en effet la particularité d'être optimales, c'est-à-dire d'avoir une complexité qui augmente linéairement avec la taille N du système. Une description complète de ces algorithmes de résolution pourra être trouvée dans Briggs et McCormick (2000); Press *et al.* (2007); Tannehill *et al.* (1997).

Pas de temps

L'intégration temporelle des termes convectifs dans Eq. (6.23) est explicite puisque ces derniers sont estimés à l'itération n . Il existe par conséquent une limite de stabilité contraignant le pas de temps Δt à suivre un critère de stabilité. Cette condition est donnée par le nombre de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) qui définit un pas de temps adimensionné. Pour la convection, ce dernier s'écrit $CFL_{conv} = \text{Max}(\|\mathbf{u}\|)\Delta t/\Delta$ avec Δ la taille de la maille. La limite de stabilité précise dépend en particulier du schéma numérique utilisé mais l'on doit typiquement respecter $CFL_{conv} \lesssim 1$.

En ce qui concerne les termes diffusifs, une intégration explicite nécessiterait de respecter une condition de stabilité $CFL_{diff} = \nu\Delta t/2\Delta^2 \lesssim 1$, qui s'avère particulièrement contraignante pour les écoulements à faibles nombres de Reynolds. C'est ce qui a motivé une approche implicite (schéma de Crank-Nicolson), théoriquement marginalement stable, ce qui signifie qu'il est possible de prendre n'importe quelle valeur de Δt , sans aucun critère à respecter. Dans les faits toutefois, des pas de temps arbitrairement grands induisent une dégradation notable des résultats et l'on conservera des CFL_{diff} typiquement inférieurs à la centaine.

6.2.2 Sous-problème particule

Le sous-problème fluide précédent est un problème classique de Navier-Stokes qui permet de calculer, dans tout le domaine, la vitesse fluide \mathbf{u}^{n+1} en fonction des grandeurs à l'itération précédente \mathbf{u}^n et $\boldsymbol{\lambda}^n$.

L'objet du sous-problème particule est multiple : il s'agit d'imposer la contrainte de corps rigide dans la particule, d'estimer le nouveau terme de forçage $\boldsymbol{\lambda}^{n+1}$ puis, au passage, de calculer les vitesses de translation et rotation des particules.

Imposition de corps rigide

Un point important, déjà souligné, est que la vitesse issue du sous-problème fluide \mathbf{u}^{n+1} ne satisfait pas parfaitement à un mouvement de corps rigide dans la particule puisqu'elle est en effet calculée avec un terme de forçage approximé au pas de temps précédent $\boldsymbol{\lambda}^n$. Dans la méthode retenue, nous forçons directement le mouvement rigide en imposant Eq. (6.20) dans chaque particule, soit :

$$\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{U}^{n+1} + \boldsymbol{\Omega}^{n+1} \wedge \mathbf{r} \quad \text{dans } \mathcal{D}_p \quad (6.29)$$

C'est bien cette vitesse $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$, qui impose désormais la condition de corps rigide dans la particule, qui est la solution du problème couplé fluide-particule.

²⁷ Il existe, même gratuites, des bibliothèques mathématiques performantes. Nous avons pourtant pris le parti de coder les méthodes d'inversion. Un choix peut-être moins efficace mais formateur et ludique et qui permet surtout de conserver la maîtrise totale de l'outil.

Correction du forçage λ

La différence entre cette vitesse $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ et la vitesse \mathbf{u}^{n+1} issue du sous-problème fluide constitue une mesure du déficit dans la capacité du terme de forçage à assurer le mouvement rigide et permet d'estimer un nouveau forçage λ^{n+1} . Rappelons en effet que la vitesse \mathbf{u}^{n+1} est calculée par résolution du problème Eq. (6.23) et Eq. (6.24) qui s'écrit (en regroupant sous le terme $\nabla \cdot \mathcal{F}^{n+1}$ les termes de convection et diffusion pour alléger l'écriture) :

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \mathcal{F}^{n+1} + \lambda^n \quad (6.30)$$

La nouvelle vitesse $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ assure la rigidité de la particule, d'où il est possible d'écrire :

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \tilde{\mathcal{F}}^{n+1} + \lambda^{n+1} \quad (6.31)$$

Par différence, on obtient l'équation permettant de mettre à jour le terme de forçage :

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n + \frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \mathbf{u}^{n+1}}{\Delta t} - \nabla \cdot (\tilde{\mathcal{F}}^{n+1} - \mathcal{F}^{n+1}) \quad (6.32)$$

En toute rigueur, le flux $\tilde{\mathcal{F}}^{n+1}$ n'est pas strictement égal à \mathcal{F}^{n+1} puisque les vitesses dans la particule ont été modifiées de par l'imposition du mouvement rigide Eq. (6.29). La pression est théoriquement également affectée mais n'est pas calculée explicitement. Le flux $\tilde{\mathcal{F}}^{n+1}$ n'est ainsi pas connu et il faudrait pour cela repasser par les coûteuses étapes du sous-problème fluide et coupler l'ensemble. Afin de conserver une expression explicite sur λ^{n+1} , il est nécessaire d'effectuer l'approximation suivante, valable pour des pas de temps modérés :

$$\tilde{\mathcal{F}}^{n+1} \approx \mathcal{F}^{n+1} \quad (6.33)$$

ce qui permet d'aboutir à l'équation recherchée d'évolution sur le terme de forçage :

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n + \frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \mathbf{u}^{n+1}}{\Delta t} \quad (6.34)$$

Calcul des vitesses particulières

Il reste maintenant pour fermer le problème à calculer les nouvelles vitesses de translation \mathbf{U}^{n+1} et de rotation $\mathbf{\Omega}^{n+1}$ afin de pouvoir calculer Eq. (6.29). Nous repartons pour cela des équations du modèle Eq. (6.21) et Eq. (6.22) qui s'écrivent sous forme discrétisée :

$$\rho_f \int_{\mathcal{P}} \lambda^{n+1} d\mathbf{x} = \frac{(\rho_f - \rho_p)}{\rho_p} M \left[\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} - \mathbf{g} \right] + \mathbf{F}^{c,n} \quad (6.35)$$

$$\rho_f \int_{\mathcal{P}} \mathbf{r} \wedge \lambda^{n+1} d\mathbf{x} = \frac{(\rho_f - \rho_p)}{\rho_p} \left[\frac{\mathbf{J} \cdot (\mathbf{\Omega}^{n+1} - \mathbf{\Omega}^n)}{\Delta t} + \mathbf{\Omega}^n \wedge (\mathbf{J} \cdot \mathbf{\Omega}^n) \right] + \mathbf{T}^{c,n} \quad (6.36)$$

En substituant Eq. (6.29) dans Eq. (6.34), nous pouvons écrire :

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n + \frac{\mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{\Omega}^{n+1} \wedge \mathbf{r} - \mathbf{u}^{n+1}}{\Delta t} \quad (6.37)$$

Enfin, en intégrant Eq. (6.37) sur le volume de la particule puis en injectant dans Eq. (6.35) et, de la même manière, $\mathbf{r} \wedge$ Eq. (6.37) injecté dans Eq. (6.36), nous obtenons les relations recherchées, soit :

$$M\mathbf{U}^{n+1} = \frac{(\rho_p - \rho_f)}{\rho_p} M[\mathbf{U}^n + \mathbf{g}\Delta t] + \rho_f \int_{\mathcal{P}} (\mathbf{u}^{n+1} - \lambda^n \Delta t) d\mathbf{x} + \mathbf{F}^{c,n} \Delta t \quad (6.38)$$

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{\Omega}^{n+1} = \frac{(\rho_p - \rho_f)}{\rho_p} [\mathbf{J} \cdot \mathbf{\Omega}^n - \mathbf{\Omega}^n \wedge (\mathbf{J} \cdot \mathbf{\Omega}^n) \Delta t] + \rho_f \int_{\mathcal{P}} \mathbf{r} \wedge (\mathbf{u}^{n+1} - \lambda^n \Delta t) d\mathbf{x} + \mathbf{T}^{c,n} \Delta t \quad (6.39)$$

Cette formulation sous-entend que les forces et moments d'interaction \mathbf{F}^c et \mathbf{T}^c sont intégrés de manière explicite, c'est-à-dire avec une estimation à l'itération n . Soulignons également que dans le cas d'une particule de forme quelconque, la matrice d'inertie \mathbf{J} n'est pas diagonale et la résolution de cette dernière équation Eq. (6.39) nécessite une inversion de cette matrice.

Nous avons précédemment souligné que les méthodes de domaine fictif sans multiplicateurs de Lagrange étaient au final très similaires. Elles ne diffèrent en fait que de la manière de calculer les vitesses des particules, c'est-à-dire les équations précédentes Eq. (6.38) et Eq. (6.39). Les relations obtenues ici sont celles issues de Yu et Shao (2007). Une analyse des travaux de Apte *et al.* (2009) montre que l'expression obtenue est identique, bien qu'exprimée différemment (formulation volumes finis, fluide compressible). Enfin, dans Veeramani *et al.* (2007), les auteurs développent une expression plus générale mais implicite. Au travers de quelques hypothèses simplificatrices, ils parviennent à une relation approchée qui est, encore une fois, celle présentée ici.

6.3 Suivi et déplacement des particules

6.3.1 Suivi des particules

Il a déjà été mentionné dans l'étude bibliographique que les méthodes eulériennes sont particulièrement attractives puisque le maillage est fixe et indépendant de la configuration des particules, ce qui permet de s'affranchir de la nécessité de remailler. Cette grande flexibilité a une contrepartie : il devient nécessaire d'être capable de définir correctement la position de l'interface fluide/particule dans la mesure où il n'y a en effet plus – numériquement – de frontières physiques entre les phases. Il existe pour ce faire tout un panel de méthodes très utilisées dans le monde des écoulements multiphasiques, méthodes dites de suivi d'interface. Il n'est pas légitime de les détailler ici dans la mesure où cela n'est pas un problème crucial dans notre cas de particules rigides puisque leur forme n'évolue pas. Citons toutefois à titre d'information deux méthodes particulièrement répandues : les méthodes VOF (*Volume-Of-Fluid*) (Hirt et Nichols, 1981) et les méthodes *level-set* (Osher et Sethian, 1988). On pourra consulter Sommerfeld *et al.* (2007) et Lakehal *et al.* (2002) pour un état des lieux plus détaillé des méthodes de suivi d'interface.

Dans notre cas, le suivi d'interface est nécessaire afin de délimiter la région fluide \mathcal{D}_f de la région particulaire \mathcal{D}_p car c'est dans cette seule région \mathcal{D}_p qu'est défini le terme de forçage. Nous avons choisi de réaliser ce suivi d'interface des particules en employant une technique de *level-set*²⁸. Cette approche (Osher et Fedkiw, 2001; Osher et Sethian, 1988) est très répandue et utilisée dans différents domaines, celui des écoulements multiphasiques bien sûr mais aussi l'analyse d'image, l'animation graphique ou l'optimisation.

Cette méthode s'appuie, pour suivre l'interface, sur une fonction de lignes de niveau $\psi(\mathbf{x})$ définie dans tout le domaine. Cette fonction est choisie de manière à être négative dans la particule et positive en dehors, l'interface étant définie par l'iso-surface $\psi(\mathbf{x})=0$. Un choix très répandu est d'affecter à cette fonction la distance signée à l'interface. Pour le cas simple d'une sphère de rayon a et centrée en \mathbf{x}_G , cette distance est connue analytiquement et vaut :

$$\psi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_G\| - a \quad (6.40)$$

Nous avons déjà évoqué en §6.1, sans la détailler toutefois, la fonction permettant d'identifier chacune des régions fluide et solide : il s'agit de la fonction indicatrice $\mathcal{I}_{\mathcal{D}}(\mathbf{x})$. L'objectif du suivi d'interface consiste entre autres à calculer cette fonction indicatrice qui vaut 1 dans le solide et 0

28. En français, lignes de niveau.

ailleurs. Elle s'exprime directement à partir de la fonction distance $\psi(\mathbf{x})$ et s'écrit :

$$\mathcal{I}_{\mathcal{P}}(\mathbf{x}) = 1 - H(\psi(\mathbf{x})) \quad (6.41)$$

avec H la fonction de Heaviside :

$$H(s) = \begin{cases} 0 & \text{si } s \leq 0 \\ 1 & \text{si } s > 0 \end{cases} \quad (6.42)$$

Cette fonction indicatrice intervient par exemple dans toutes les intégrales s'opérant sur le volume d'une particule ainsi que dans le calcul de la masse, volume ou moment d'inertie des particules.

Numériquement, il est rarement satisfaisant d'utiliser des fonctions discontinues comme Eq. (6.42). Non pas que cela pose des problèmes numériques dans le cas présent²⁹ mais il s'avère que cela dégrade la précision spatiale comme nous allons l'illustrer. Concrètement, il est ainsi préférable d'utiliser une version lissée de la fonction de Heaviside que nous notons H_{Δ} . Un choix courant est une fonction de type :

$$H_{\Delta}(s) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh\left(b \frac{s}{\Delta}\right) \right) \quad (6.43)$$

où Δ est la taille de la maille et b un paramètre libre réglant la « raideur » du lissage. Ceci correspond au final à lisser la fonction de Heaviside sur une fraction (de l'ordre de $1/b$) de la taille de maille. La Figure 6.4 présente, pour deux choix du paramètre b ($b=500$ et $b=5$), la fonction $H_{\Delta}(s)$ ainsi qu'un aperçu de la fonction indicatrice calculée en 2D pour un disque de rayon unitaire. Le choix $b=500$ correspond à une quasi-absence de lissage et équivaut donc grossièrement à la fonction H discontinue de Eq. (6.42).

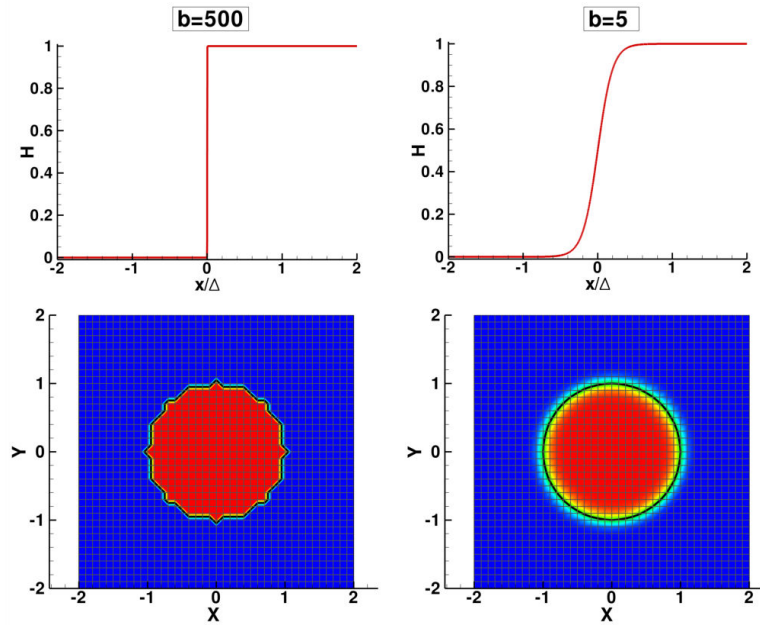


Fig. 6.4 – Fonctions de Heaviside $H(x/\Delta)$ (en haut) et champ de fonction indicatrice $\mathcal{I}_{\mathcal{P}}$ (en bas) pour $b=500$ (à gauche) et $b=5$ (à droite).

Cette figure illustre qu'une absence de lissage (cas $b=500$) conduit à un motif quelque peu discontinu sur ce maillage grossier (figure de gauche). L'intérêt du lissage est clairement mis en évidence sur la figure de droite où la fonction indicatrice, qui matérialise la particule, prend ici une forme bien circulaire. Il permet ainsi d'améliorer la convergence spatiale puisqu'il est possible de

29. Cela peut toutefois être le cas, par exemple lors de sauts de densité très élevés.

décrire correctement la particule (forme, masse,...) avec des maillages modérément fins.

Le choix $b=5$ est typiquement celui qui sera fait dans le cadre de ce travail car il permet un bon compromis en offrant un lissage convenable tout en maintenant une épaisseur de lissage réduite. La Figure 6.4 (en haut à droite) montre que la fonction Heaviside est lissée sur une épaisseur d'environ une demi-maille de part et d'autre de l'interface. L'effet de la fonction H_Δ sur les calculs a été évalué et a confirmé que le choix $b=5$ est un bon compromis. D'autres types de fonction ont également été testés. Quelques différences peuvent exister selon le choix de la fonction $H_\Delta(s)$, surtout pour les maillages grossiers, mais elles restent mineures, ces différences s'estompant évidemment à mesure que le maillage est raffiné.

L'usage de la fonction indicatrice est omniprésent dans le modèle numérique développé. En effet, chaque intégrale effectuée sur une particule \mathcal{P} est concrètement calculée par l'intégrale, sur le domaine total, de la quantité d'intérêt multipliée par la fonction indicatrice. Par exemple, pour calculer la vitesse de translation \mathbf{U}^{n+1} des particules Eq. (6.38), il est nécessaire d'estimer l'intégrale de la vitesse dans la particule \mathcal{P} , soit :

$$\int_{\mathcal{P}} \mathbf{u}^{n+1} d\mathbf{x} = \int_{\mathcal{D}} \mathcal{I}_{\mathcal{P}}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u}^{n+1} d\mathbf{x} \quad (6.44)$$

Dans la pratique, il sera inutile d'intégrer sur tout le domaine \mathcal{D} mais seulement sur une petite région englobant la particule. Cette zone (boîte de contrôle) sera précisée ultérieurement en §6.3.3.

6.3.2 Déplacement des particules

Les particules étant rigides, leur position et orientation peuvent être connues en ne suivant que des points caractéristiques appartenant à cette particule. Pour le cas particulier de sphères, seul le centre de gravité nécessite d'être considéré. En conséquence, seule la vitesse de translation est nécessaire pour suivre la position de la particule qui est donnée par l'équation différentielle :

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{U} \quad (6.45)$$

où \mathbf{X} est le vecteur des coordonnées des centres de gravité des N_p particules (dimension $3N_p$). Dans le cas de particules non sphériques, l'équation à résoudre resterait identique mais \mathbf{X} serait un vecteur de position généralisé contenant également des informations sur l'orientation et, de la même façon, \mathbf{U} contiendrait les vitesses de translation mais aussi de rotation.

La résolution des sous-problèmes fluide et particule a en particulier permis de calculer la nouvelle vitesse \mathbf{U}^{n+1} . Cette information est utilisée pour intégrer Eq. (6.45) par un schéma d'Adams-Bashforth d'ordre 2 :

$$\mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{X}^n + \frac{\Delta t}{2} (3\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n) \quad (6.46)$$

6.3.3 Transport du terme de forçage

Jusqu'à présent, notre formulation était restée assez proche des travaux de Yu et Shao (2007) et Apte *et al.* (2009) pour le traitement du terme de forçage λ . Dans ces études, le champ de λ est calculé sur un maillage lagrangien attaché à chaque particule. Ce choix est légitime dans la mesure où cette grandeur est associée à la particule et que cette particule se déplace de manière lagrangienne dans le maillage. Cela reste proche des idées d'origine des méthodes à frontières immergées.

L'usage de ce maillage lagrangien associé à chaque particule pour calculer spécifiquement le terme de forçage induit toutefois un coût calcul majoré puisqu'il devient nécessaire de transférer

les grandeurs du maillage lagrangien (sur lequel est calculé λ) vers le maillage eulérien (sur lequel est calculé u). Plus précisément, trois interpolations sont nécessaires par pas de temps : un transfert eulérien→lagrangien de la quantité $\tilde{u}^{n+1} - u^n$ (Eq. (6.34)), un transfert lagrangien→eulérien de la quantité λ^n (Eq. (6.23)) et un transfert eulérien→lagrangien de u^{n+1} (Eq. (6.38) et Eq. (6.39)).

Les interpolations entre maillages lagrangiens et eulériens sont également connues pour induire des instabilités numériques comme le détaillent les travaux de Yu et Shao (2007), ce qui nécessite une certaine prise de précaution. En particulier, il semble que le choix de la méthode d'interpolation ait une importance certaine et certains auteurs insistent sur la nécessité d'utiliser des interpolations d'ordre élevé (Peskin, 2002; Uhlmann, 2005). Enfin, il semble que la nature même du maillage lagrangien ait une influence sur les résultats. Certains travaux (Ladd et Verberg, 2001; Yu et Shao, 2007; Yu *et al.*, 2006) préconisent en effet un maillage dont les points soient arrangés de manière concentrique dans la particule mais aussi légèrement rétractés par rapport à la surface de la particule. La transposition à des particules de forme arbitraire n'est pas abordée et ne semble pas directe.

C'est pour toutes ces raisons qu'il nous a semblé légitime de conserver la simplicité d'une approche « tout eulérien » avec un terme de forçage calculé sur l'unique maillage global. Cela ne modifie en rien les équations développées jusqu'à présent : le champ de $\lambda_{\mathcal{P}}$ (l'indice soulignant ici que cette variable est spécifique à chaque particule \mathcal{P}) est distribué sur le maillage eulérien.

La seule spécificité est que cette grandeur doit rester « attachée » à la particule et que lorsque cette dernière se déplace, il est nécessaire de transporter ce terme de forçage en conséquence. L'idée simple consiste à insérer dans la procédure numérique une phase de transport en résolvant la simple équation d'advection suivante, pour chaque sphère \mathcal{P} :

$$\frac{\partial \lambda_{\mathcal{P}}}{\partial t} + \mathbf{U}_{\mathcal{P}} \cdot \nabla \lambda_{\mathcal{P}} = 0 \quad (6.47)$$

Il est bien sûr peu approprié de résoudre cette équation sur tout le maillage dans la mesure où l'on ne s'intéresse qu'à une zone limitée autour de chaque particule. Cette mauvaise idée nécessiterait de dupliquer N_p champs de $\lambda_{\mathcal{P}}$ dans tout le domaine et induirait un coût calcul et mémoire important et inutile.

Nous définissons ainsi une zone d'intérêt autour de chaque particule et dans laquelle est résolue Eq. (6.47). Cette zone, que nous dénommons boîte de contrôle³⁰, s'étend typiquement de 2Δ autour de la particule. La Figure 6.5 schématise cette approche. Nous insistons sur le fait qu'il ne s'agit pas d'un maillage lagrangien se déplaçant avec la particule mais juste d'une portion du maillage global qui est fixe.

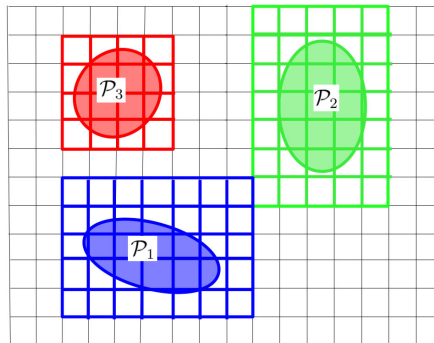


Fig. 6.5 – Exemple de boîtes de contrôle autour de particules.

La résolution d'une équation classique d'advection comme Eq. (6.47) donne lieu à une grande variété de méthodes. La difficulté réside toutefois dans le fait que la fonction λ est peu sympathique

30. Nettement plus professionnel, le vocable de « volume englobant » peut aussi être employé ("Bounding Volumes").

pour le numéricien puisqu'elle est discontinue (elle est non-nulle uniquement dans \mathcal{D}_p) et prend la plupart du temps sa valeur maximale sur le bord du domaine \mathcal{D}_p , c'est-à-dire à la surface de la particule. Le terme discontinu est toutefois à relativiser car nous avons vu que la fonction indicatrice est lissée sur une fraction de la taille de maille.

Nous avons codé et testé différentes méthodes numériques pour résoudre Eq. (6.47), en particulier des méthodes d'ordre élevé et adaptées au traitement des fonctions discontinues comme un schéma ENO (*Essentially Non-Oscillatory*) d'ordre 3 (Harten *et al.*, 1987), un schéma WENO (*Weighted-ENO*) d'ordre 5 (Liu *et al.*, 1994) et un schéma WKL (Warming-Kutler-Lomax) d'ordre 4 (Huang, 1994). Les résultats obtenus se sont avérés quelque peu décevants puisque ces trois schémas se montrent peu efficaces pour transporter une fonction raide sans dissipation et dispersion notables lorsqu'ils sont utilisés sur des maillages relativement grossiers³¹.

Le choix qui s'est avéré le plus efficace est la classe des schémas dits semi-lagrangiens, souvent utilisés en météorologie et bien adaptés au maillage cartésien (Bermejo et Staniforth, 1992; Huang, 1994; Staniforth et Côté, 1991). Nous reportons dans l'annexe A quelques informations complémentaires sur cette technique. En deux mots, cette méthode consiste simplement à calculer la grandeur $\lambda(\mathbf{x}, t + \Delta t)$ en interpolant les valeurs de cette dernière à la position $\mathbf{x} - \mathbf{U}_{\mathcal{D}} \Delta t$. Le choix de la méthode d'interpolation gouverne la précision du schéma. Il est possible d'utiliser une interpolation (tri-)linéaire mais cela induit une diffusion excessive et il s'avère nécessaire de recourir à des méthodes d'interpolation plus précises. Notre meilleur compromis précision/temps calcul est une interpolation par polynômes de Lagrange d'ordre 2 (voir annexe A). Remarquons que ce choix peut rappeler les interpolations entre maillages eulérien et lagrangien évoquées précédemment. Il s'agit toutefois ici d'un choix numérique de résolution qui conserve l'intérêt de l'approche tout eulérien (en particulier, absence des points lagrangiens sur les particules).

6.3.4 Calcul des grandeurs rhéologiques

La notion de contrainte particulaire a déjà été abordée dans les généralités sur la rhéologie. Nous avons eu l'occasion de souligner que cette contrainte, induite par la présence même des particules, est à l'origine de l'augmentation de viscosité apparente d'une suspension ou encore d'effets non-newtoniens. Dans la mesure où ce travail se concentre en partie sur la rhéophysique des suspensions, il est nécessaire que le modèle numérique développé puisse calculer des grandeurs rhéologiques, grandeurs qui peuvent en fait toutes être définies à partir du tenseur des contraintes particulières. Du point de vue numérique, il est possible de calculer ce tenseur très naturellement en utilisant le champ du terme de forçage λ .

Dans le cas de particules rigides, et en négligeant les effets d'inertie, l'expression du tenseur des contraintes particulières Σ^p est donnée par Eq. (3.15)

$$\Sigma^p = \frac{1}{V} \int_{\partial \mathcal{D}} (\Sigma \cdot \mathbf{n} \otimes \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad (6.48)$$

avec \mathbf{x} le vecteur de position par rapport au centre de la particule. Ceci peut également se réécrire, en utilisant Eq. (3.12), sous la forme

$$\Sigma^p = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{D}} (\nabla \cdot \Sigma \otimes \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{D}} \Sigma \, d\mathbf{x} \quad (6.49)$$

D'un point de vue numérique, la conservation de la quantité de mouvement Eq. (6.2) s'écrit, toujours en négligeant l'inertie : $\nabla \cdot \Sigma = -\rho_f \lambda$. Par ailleurs, dans une approche de type domaine fictif, la

31. Bien entendu, l'utilisation de maillages fins améliore les choses mais conduirait à un temps calcul important qui limiterait fortement les capacités du code à traiter un grand nombre de particules.

particule est supposée « remplie » de fluide. Ceci signifie que dans Eq. (6.49), le tenseur Σ représente la contrainte fluide, même dans la particule. Avec une condition de corps rigide (taux de déformation nul), l'expression de cette contrainte fluide dans la particule se simplifie en $\Sigma = -p\mathbf{I}$ avec p la pression. L'Eq. (6.49) s'écrit au final

$$\Sigma^p = -\frac{\rho_f}{V} \int_{\mathcal{D}} (\lambda \otimes \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} - \frac{1}{V} \int_{\mathcal{D}} p \mathbf{I} \, d\mathbf{x} \quad (6.50)$$

La connaissance de ce tenseur permet de remonter à toutes les grandeurs d'intérêt comme la viscosité ou les différences de contraintes normales.

6.4 Conditions limites

La prise en compte des conditions limites ne pose pas de problèmes particuliers dans un formalisme de type différences finies sur maillage structuré. Nous définissons des nœuds « fantômes » de part et d'autre du domaine pour imposer les conditions sur la vitesse et la pression. Dans chacune des directions, les extrémités du domaine sont ainsi complétées par ces nœuds fantômes où les conditions seront imposées. Pour l'exemple de la direction x définie par $i \in [1, N_x]$, ces nœuds fantômes sont situés en $i=0$ et $i=N_x+1$.

Les conditions limites disponibles dans le code sont : Paroi, Vitesse imposée, Symétrie, Sortie, Périodicité. Dans tout ce qui suit, l'exemple de la paroi latérale $x=0$ sera pris afin de préciser ces conditions limites, soit en $i=0$ et $(j, k) \in [1, N_y] \times [1, N_z]$.

- Paroi :

Elle est utilisée pour simuler la présence de parois solide fixes.

Une condition d'adhérence est imposée sur la vitesse, soit $\mathbf{u}_{(i=0)} = 0$. En ce qui concerne la pression, il est possible de déduire que dans ce cas, la condition limite à imposer est de type Neumann, soit $dp/dn=0$ (Tanguy, 2004) ou, sous forme discrétisée, $p_{(i=0)} = p_{(i=1)}$.

- Vitesse imposée :

Elle permet de modéliser l'injection de fluide sur une partie du domaine ou bien le mouvement d'une paroi mobile, en particulier pour imposer un cisaillement ou un écoulement torsionnel par exemple. De manière similaire, cette condition s'écrit $\mathbf{u}_{(i=0)} = \mathbf{u}_{imp}$ et $p_{(i=0)} = p_{(i=1)}$ pour la pression. Le vecteur vitesse \mathbf{u}_{imp} est choisi par l'utilisateur et peut être quelconque.

- Symétrie :

Elle sert à imposer un plan de symétrie et permet, le cas échéant, de réduire la taille du domaine. Cette symétrie impose de conserver les mêmes vitesses tangentielles et des vitesses normales opposées, soit ici $u_{(i=0)} = -u_{(i=1)}$; $v_{(i=0)} = v_{(i=1)}$ et $w_{(i=0)} = w_{(i=1)}$.

- Sortie :

C'est une condition de type frontière ouverte permettant au fluide de sortir (ou d'entrer) librement du domaine selon l'écoulement. D'une manière générale, il s'agit toujours des conditions les plus difficiles à mettre en œuvre et il en existe plusieurs formulations de complexité variable. Nous suivons ici une approche simple proposée par certains auteurs (Nguyen *et al.*, 2001; Tanguy, 2004) et qui s'avère fonctionner de manière satisfaisante. Il s'agit d'imposer une condition de Dirichlet homogène sur la pression, soit $p_{(i=0)} = 0$, et une condition de Neumann sur la vitesse, soit $\mathbf{u}_{(i=0)} = \mathbf{u}_{(i=1)}$.

- Périodicité :

En mettant en correspondance deux limites, ce type de condition est utile pour simuler un

domaine infini dans une direction en supposant que l'écoulement qui sort d'une des limites est réinjecté à l'identique à la limite opposée. Ceci s'écrit pour la vitesse : $\mathbf{u}_{(i=0)} = \mathbf{u}_{(i=N_x)}$ et $\mathbf{u}_{(i=N_x+1)} = \mathbf{u}_{(i=1)}$. La même expression est utilisée pour la pression.

En ce qui concerne les particules, le seul traitement spécifique est lié à la condition de périodicité. Comme l'illustre la Figure 6.6, une particule peut partiellement franchir la limite périodique et seule une partie de celle-ci, notée \mathcal{P}_r (r pour réelle), appartient au domaine effectif de calcul. Pour assurer la périodicité, une particule « miroir » de mêmes propriétés, est créée et placée à une position décalée de la distance L . De ce fait, la partie hors domaine de la particule réelle est exactement compensée par la fraction \mathcal{P}_{mir} de la particule miroir appartenant au domaine de calcul, soit $\mathcal{P} = \mathcal{P}_r + \mathcal{P}_{mir}$.

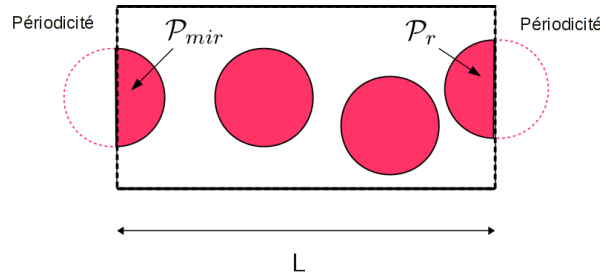


Fig. 6.6 – Schéma de la périodicité pour les particules (en 2D).

La création de ces nouvelles particules doit être prise en compte dans le modèle numérique. Seules les particules réelles (i.e., celles dont le centre de gravité appartient au domaine de calcul) sont suivies mais certaines étapes de calcul, en particulier toutes les intégrales sur les particules, doivent tenir compte de la contribution « miroir » d'une particule débordant partiellement de la limite périodique. Il s'agit en fait d'une simple décomposition de l'intégrale sur les différentes portions de la particule. L'intégrale d'une quantité $Q(\mathbf{x})$ sur une particule \mathcal{P} s'écrit alors :

$$\int_{\mathcal{P}} Q(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\mathcal{P}_r} Q(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\mathcal{P}_{mir}} Q(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad (6.51)$$

Le schéma présenté en Figure 6.6 illustre le cas d'un domaine avec une unique condition périodique. Pour deux conditions périodiques, une particule peut ainsi avoir trois autres particules miroirs si elle se situe à l'intersection de deux limites périodiques (coins du domaine). Il est également tout à fait possible d'imposer trois conditions de périodicité en 3D, ce qui signifie que toutes les frontières du domaine sont périodiques deux à deux. Ce cas n'est toutefois pas traité dans notre code. Cette dernière configuration se rencontre quelquefois dans le cas d'un écoulement de cisaillement. Il y a toutefois un traitement spécifique à effectuer afin d'imposer simultanément le cisaillement et la périodicité (conditions de Lees et Edwards (1972)).

6.5 Forces de lubrification

Ce chapitre présente la modélisation et la mise en œuvre numérique d'une force supplémentaire jouant un rôle capital dans le cas des suspensions concentrées : la force de lubrification. Nous discutons dans un premier temps son origine, présentons ensuite une étude bibliographique sur la manière dont elle peut être prise en compte puis rappelons enfin quelques éléments théoriques utiles pour la modélisation. Nous décrivons ensuite la méthode de prise en compte des forces de lubrification dans notre code de calcul.

6.5.1 Origine

Supposons deux particules sphériques de rayons identiques a s'approchant avec une vitesse relative δv et séparées d'une distance ξa (Figure 6.7). A mesure que les deux particules se rapprochent l'une de l'autre, il devient de plus en plus difficile d'évacuer le fluide interstitiel d'entre les deux sphères. Ceci donne lieu à une surpression et donc une force, dite de lubrification, qui tend à s'opposer au mouvement relatif des particules et à leur rapprochement. Cette force devient particulièrement importante à mesure que la distance ξa tend vers zéro, les effets de la viscosité prédominant à ces petites échelles. Une analyse théorique montre ainsi que ces forces sont singulières au contact ($\xi=0$) : dans le cas de l'écoulement de la Figure 6.7, la force normale diverge en $\delta v/\xi$ (les forces tangentielles sont quant à elles singulières en $\delta v \ln \xi$). Les forces de lubrification sont donc répulsives quand les particules s'approchent et attractives lorsqu'elles s'éloignent.

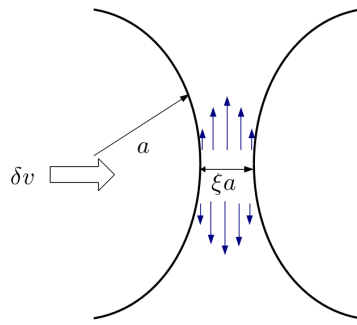


Fig. 6.7 – Schéma de l'écoulement entre deux particules s'approchant à la vitesse relative δv .

Cette singularité peut être surprenante puisque cela signifie que les deux sphères ne pourront jamais entrer en contact, ce qui se démontre mathématiquement (Lefebvre, 2007b). Cette conclusion n'est toutefois valable que dans le cas idéalisé de deux sphères non-inertiels, infiniment rigides, parfaitement lisses et dans le cadre d'une hypothèse de milieu continu pour le fluide interstitiel (en particulier, validité de la condition d'adhérence du fluide à la surface particule). Ces deux dernières hypothèses tombent généralement à mesure que ξ tend vers 0. En particulier, la rugosité des particules induit naturellement un contact entre particules via ces aspérités, ce qui borne la distance ξa à une taille caractéristique des rugosités.

Ces forces hydrodynamiques de lubrification sont importantes lorsque la distance adimensionnée ξ devient extrêmement faible. Ces distances très petites sont couramment rencontrées pour des suspensions non-browniennes et non-colloïdales à des fractions volumiques modérées. Dans le cas d'un cisaillement par exemple, l'écoulement tend naturellement à rapprocher les particules les unes des autres impliquant ainsi des distances particulièrement faibles. A titre d'exemple, certaines simulations (dynamique stokésienne) de suspensions concentrées en cisaillement attestent de distances $\xi \sim \mathcal{O}(10^{-8})$ (Bossis et Brady, 1984) voire même $\xi \sim \mathcal{O}(10^{-11})$! (Ball et Melrose, 1995; Dratler et Schowalter, 1996; Melrose et Ball, 1995). Ce dernier cas correspond, pour des particules de $100 \mu\text{m}$, à une distance fantaisiste de 10^{-15} m ! Comme nous l'avons évoqué précédemment, la présence de rugosités est susceptible d'entraîner un contact avant d'atteindre ces valeurs extrêmes.

D'une manière générale, les distances interparticulaires moyennes diminuent avec la fraction volumique ϕ selon une loi d'échelle de type $\xi \propto \phi^{-1/3}$. Ainsi, à fraction volumique élevée, les particules sont toutes très proches les unes des autres, ce qui implique que les forces de lubrification jouent un rôle prépondérant dans les suspensions concentrées. Pour autant, traiter le problème

de lubrification n'est pas chose aisée puisque ces forces prennent leur importance à des distances réduites très faibles, typiquement plusieurs ordres de grandeur plus petites que la taille de la maille de calcul. La difficulté est donc de modéliser ces forces qui ne peuvent pas être complètement décrites à l'échelle de la maille. La simulation numérique ne permet ainsi pas de les traiter explicitement de manière satisfaisante, sauf à recourir à des maillages gigantesques et des temps calcul associés rédhibitoires.

6.5.2 Modélisation : état de l'art

La problématique de la modélisation des forces de lubrification se pose pour n'importe quelle approche numérique. A ce stade, rappelons juste que ces forces de lubrification peuvent être estimées théoriquement (nous y reviendrons dans le chapitre suivant), mais cela ne résout pas le problème pour autant ! En effet, les forces de lubrification étant des forces hydrodynamiques, elles sont implicitement prises en compte dans la simulation, bien qu'imparfaitement. A mesure que la distance interparticulaire tend vers zéro, cette prise en compte est de plus en plus approximative. La difficulté essentielle est donc de connaître ce qui est effectivement résolu par la simulation et ce qui reste à modéliser.

Au vu de la littérature, il semble qu'aucune approche n'intègre ces forces de lubrification de manière rigoureuse. L'approche la plus répandue consiste à simplement rajouter la force de lubrification théorique $F_{lub}^{th}(\xi)$. Plus précisément, les auteurs ajoutent plutôt une « correction » de force de lubrification de la forme $F_{lub}^{th}(\xi) - F_{lub}^{th}(\xi_{cut})$ où ξ_{cut} est une distance de coupure au-delà de laquelle la correction de lubrification n'est pas activée. L'inexactitude de cette approche tient au fait que, comme nous l'avons indiqué, une partie de la force de lubrification est déjà partiellement résolue par la simulation. Le fait de rajouter ce terme de lubrification correspond donc en quelque sorte à un double compte de la partie résolue de la lubrification. Pour autant, cette technique approchée se retrouve de manière courante quelle que soit la méthode de calcul : en domaine fictif (Yu *et al.*, 2006), dynamique particulaire dissipative (Martys, 2005), Boltzmann sur réseau (Komnik *et al.*, 2004; Nguyen et Ladd, 2002) ou méthode aux éléments de frontière (Nasseri *et al.*, 2000).

La méthode qui semble la plus correcte de ce point de vue est celle utilisée en dynamique stokésienne, approche déjà décrite précédemment. Rappelons que le cœur de cette méthode consiste à construire une matrice de résistance liant vitesses et forces pour toutes les particules. Cette matrice, notée \mathcal{R}^∞ , représente une approximation des interactions en champ lointain et – comme dans nos calculs – ne contient la lubrification que de manière très inexacte. L'idée développée (Bossis et Brady, 1984; Durlofsky *et al.*, 1987; Ladd, 1990) consiste à rajouter la matrice de résistance théorique exacte à deux sphères \mathcal{R}_{2B} , issue de la théorie de la lubrification, mais aussi (et c'est là le point important) de retrancher la partie des interactions proches déjà contenues dans \mathcal{R}^∞ afin de ne pas la compter deux fois. En appelant \mathcal{R}_{2B}^∞ cette contribution, la matrice globale du problème s'écrit $\mathcal{R} = \mathcal{R}^\infty + \mathcal{R}_{2B} - \mathcal{R}_{2B}^\infty$. Cette approche attrayante n'est toutefois adaptée qu'à la dynamique stokésienne seule et est difficilement transposable, d'un point de vue pratique, à une méthode de simulation directe dans laquelle les matrices de résistance ne sont pas explicitement calculées.

L'idée de base a toutefois été reprise dans le cadre de la méthode FCM (voir §5.1.3) par Maxey *et al.* (Dance et Maxey, 2003; Yeo et Maxey, 2010c). Il s'agit de simuler – sans correction de lubrification – les forces s'exerçant sur un doublet de particules dans différentes configurations et avec différentes distances adimensionnées ξ . Ces simulations permettent de construire une approximation (sous forme d'un polynôme de degré 4) des composantes de la matrice de résistance en fonction de ξ . Cette approximation représente ainsi la partie résolue des interactions proches et correspond à la matrice \mathcal{R}_{2B}^∞ de la dynamique stokésienne. La force de lubrification, à travers sa matrice de résistance, est donc calculée comme la matrice théorique exacte \mathcal{R}_{2B} à laquelle on retranche la partie \mathcal{R}_{2B}^∞ résolue par la simulation.

Cette manière de procéder est applicable à toutes les méthodes numériques. Elle implique une batterie de calculs laborieux pour estimer \mathcal{R}_{2B}^∞ (nombreuses configurations à simuler pour chacune des fonctions de résistance), calculs qui ne sont toutefois réalisés qu'une fois pour toutes.

D'autres méthodes, moins répandues, existent cependant. Dans le cadre des éléments finis étendus (X-FEM), Wagner *et al.* (2003) proposent d'enrichir la solution localement avec la théorie de la lubrification pour capturer l'écoulement lubrifié. Il s'agit d'un des premiers couplages entre DNS et lubrification, qui est toutefois resté en 2D et avec un petit nombre de particules (~ 10). Une autre méthode recensée se base sur une modification de la géométrie du système (Mammoli, 2006). Il s'agit de modifier quelque peu la taille d'une particule d'un doublet de manière à ce que la distance interparticulaire soit suffisante pour que la simulation puisse résoudre explicitement l'écoulement et donc estimer correctement les forces mises en jeu. La comparaison entre cette force et la force exacte théorique dans cette configuration modifiée permet d'estimer la force résolue par la simulation. Cette approche, utilisée dans le cadre d'une méthode d'intégrales de frontières, semble difficilement transposable à notre cas.

Ces approches ont toutefois un point commun : elles utilisent les formulations théoriques exactes de la lubrification pour le problème à deux sphères. Ces méthodes font également l'hypothèse d'une additivité par paires des forces pour approximer le problème à plusieurs particules : les forces de lubrification théoriques n'étant connues que pour deux particules, on construit les interactions à N_p particules par sommation paire à paire des interactions à deux corps. Cette hypothèse, très largement utilisée, semble plausible du fait de la nature à très courte portée des forces de lubrification même s'il semble exister quelques cas particuliers où elle devient moins précise (Cichocki *et al.*, 1999; Wilson, 2013). Il est également possible de faire le choix de l'additivité des vitesses (i.e., sommation des perturbations de vitesse théorique calculées par paires). Celle-ci n'est généralement pas utilisée car pouvant conduire à des vitesses quelquefois peu physiques (Brady et Bossis, 1988). Pour l'avoir testé, nous ne pouvons qu'être d'accord avec ces auteurs !

A titre anecdotique, terminons par les seules approches qui, par construction, n'auraient pas besoin de modéliser la force de lubrification : ce sont les méthodes directes de type ALE que nous avons déjà présentées. En remaillant suffisamment entre chaque particule, l'écoulement interstitiel peut correctement être résolu et, par conséquent, les forces de lubrification aussi. Cela ne reste toutefois que théorique car à mesure que les particules se rapprochent, les mailles de calcul deviennent si petites que le calcul devient tout bonnement prohibitif avec les moyens informatiques actuels.

6.5.3 Un peu de théorie

Quelle que soit la méthode employée, elle s'appuie d'une manière ou d'une autre sur la théorie de la lubrification. Des développements théoriques sont en effet possibles dans le cas, linéaire, des équations de Stokes avec un écoulement extérieur imposé lui-même linéaire et – point important – uniquement dans le cas de deux particules sphériques.

Considérons deux sphères (indiquées 1 et 2) plongées dans un écoulement imposé linéaire $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}) = \mathbf{u}_0^\infty + \mathbf{E}^\infty \cdot \mathbf{x} + \boldsymbol{\omega}^\infty \wedge \mathbf{x}$ avec \mathbf{E}^∞ le tenseur du taux de déformation et $\boldsymbol{\omega}^\infty$ le vecteur de rotation. Les relations, linéaires, liant les forces aux vitesses sont appelées **relations de résistance** et les relations liant les vitesses aux forces sont les **relations de mobilité**. Avec \mathbf{F} et \mathbf{T} , la force et le moment s'exerçant

sur les particules, et \mathbf{U} et $\mathbf{\Omega}$ leur vitesse de translation et rotation, la relation de mobilité s'écrit

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_1) - \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_2) - \mathbf{U}_2 \\ \boldsymbol{\omega}^\infty - \mathbf{\Omega}_1 \\ \boldsymbol{\omega}^\infty - \mathbf{\Omega}_2 \end{pmatrix} = \mathcal{M}_{2B} \begin{pmatrix} \eta^{-1}\mathbf{F}_1 \\ \eta^{-1}\mathbf{F}_2 \\ \eta^{-1}\mathbf{T}_1 \\ \eta^{-1}\mathbf{T}_2 \\ \mathbf{E}^\infty \\ \mathbf{E}^\infty \end{pmatrix} \quad (6.52)$$

et en résistance :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ \mathbf{T}_1 \\ \mathbf{T}_2 \end{pmatrix} = \eta \mathcal{R}_{2B} \begin{pmatrix} \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_1) - \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_2) - \mathbf{U}_2 \\ \boldsymbol{\omega}^\infty - \mathbf{\Omega}_1 \\ \boldsymbol{\omega}^\infty - \mathbf{\Omega}_2 \\ \mathbf{E}^\infty \\ \mathbf{E}^\infty \end{pmatrix} \quad (6.53)$$

Les matrices de passage sont les matrices de mobilité \mathcal{M}_{2B} et de résistance \mathcal{R}_{2B} , l'indice $2B$ rappelant qu'il s'agit d'une configuration à deux corps (*two-body*). Dans le cas à deux particules, ces deux relations sont strictement équivalentes et l'on peut utiliser l'une ou l'autre indifféremment, soit $\mathcal{M}_{2B} = \mathcal{R}_{2B}^{-1}$. Lorsque pour N_p particules, ces matrices de passage sont construites par sommation paires à paires (hypothèses d'additivité), il n'y a plus d'équivalence entre résistance et mobilité. Dans le cas d'interactions de lubrification, il est alors préférable d'opter pour la formulation en résistance qui traduit mieux la physique des interactions multiples dans la mesure où cela correspond à sommer des forces plutôt que des perturbations de vitesse. Le choix de la mobilité, pour la lubrification, conduit en effet dans la plupart des cas à l'obtention de vitesses fantaisistes, comme nous l'avons déjà fait remarquer. Nous ne présentons ainsi par la suite que les matrices de résistance.

La matrice de résistance théorique pour deux particules s'écrit (Kim et Karrila, 1991)

$$\mathcal{R}_{2B} = \begin{bmatrix} \mathcal{A}^{11} & \mathcal{A}^{12} & (\mathcal{B}^{11})^T & (\mathcal{B}^{21})^T & \tilde{\mathcal{G}}^{11} & \tilde{\mathcal{G}}^{21} \\ \mathcal{A}^{12} & \mathcal{A}^{22} & (\mathcal{B}^{12})^T & (\mathcal{B}^{22})^T & \tilde{\mathcal{G}}^{12} & \tilde{\mathcal{G}}^{22} \\ \mathcal{B}^{11} & \mathcal{B}^{12} & \mathcal{C}^{11} & \mathcal{C}^{12} & \tilde{\mathcal{H}}^{11} & \tilde{\mathcal{H}}^{21} \\ \mathcal{B}^{21} & \mathcal{B}^{22} & \mathcal{C}^{12} & \mathcal{C}^{22} & \tilde{\mathcal{H}}^{12} & \tilde{\mathcal{H}}^{22} \end{bmatrix} \quad (6.54)$$

Cette matrice se décompose en sous-matrices \mathcal{A} , \mathcal{B} et \mathcal{C} de rang 2 et en sous-matrices $\tilde{\mathcal{G}}$ et $\tilde{\mathcal{H}}$ de rang 3. Pour une particule axisymétrique, ces tenseurs peuvent s'exprimer en fonction de plusieurs grandeurs scalaires. En posant \mathbf{r} le vecteur de séparation entre les deux particules $\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ et $\mathbf{d} = \mathbf{r}/\|\mathbf{r}\|$, ces différents tenseurs s'écrivent (Kim et Karrila, 1991) :

$$\mathcal{A}_{ij}^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^A d_i d_j + Y_{\alpha\beta}^A (\delta_{ij} - d_i d_j) \quad (6.55)$$

$$\mathcal{B}_{ij}^{\alpha\beta} = Y_{\alpha\beta}^B \epsilon_{ijk} d_k \quad (6.56)$$

$$\mathcal{C}_{ij}^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^C d_i d_j + Y_{\alpha\beta}^C (\delta_{ij} - d_i d_j) \quad (6.57)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}_{ijk}^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^G (d_j d_k - \frac{1}{3} \delta_{jk}) d_i + Y_{\alpha\beta}^G (d_j \delta_{ik} + d_k \delta_{ij} - 2 d_i d_j d_k) \quad (6.58)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_{ijk}^{\alpha\beta} = Y_{\alpha\beta}^H (\epsilon_{jil} d_l d_k + \epsilon_{kil} d_l d_j) \quad (6.59)$$

avec δ_{ij} le symbole de Kronecker et ϵ_{ijk} le symbole de Levi-Civita :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad \epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{si } (i, j, k) \text{ est une permutation paire} \\ -1 & \text{si } (i, j, k) \text{ est une permutation impaire} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Les différentes fonctions scalaires $X_{\alpha\beta}$ et $Y_{\alpha\beta}$ dépendent de la distance entre les deux particules et de leur rapport de taille. Dans le cas où les particules sont très proches, ces fonctions s'écrivent analytiquement via un développement asymptotique. Pour ne pas alourdir le manuscrit, les expressions utilisées sont reportées en annexe B. Notons enfin qu'en mobilité, les expressions précédentes restent inchangées et seules les fonctions scalaires s'expriment différemment.

La théorie de la lubrification fournit également des expressions exactes sur le déviateur du stresslet \mathbf{S}^{dev} des deux particules (Kim et Karrila, 1991)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{S}_1^{dev} \\ \mathbf{S}_2^{dev} \end{pmatrix} = \eta \begin{bmatrix} \mathcal{G}^{11} & \mathcal{G}^{12} & \mathcal{H}^{11} & \mathcal{H}^{12} & \mathcal{M}^{11} & \mathcal{M}^{12} \\ \mathcal{G}^{21} & \mathcal{G}^{22} & \mathcal{H}^{21} & \mathcal{H}^{22} & \mathcal{M}^{21} & \mathcal{M}^{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_1) - \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_2) - \mathbf{U}_2 \\ \boldsymbol{\omega}^\infty - \boldsymbol{\Omega}_1 \\ \boldsymbol{\omega}^\infty - \boldsymbol{\Omega}_2 \\ \mathbf{E}^\infty \\ \mathbf{E}^\infty \end{pmatrix} \quad (6.60)$$

avec

$$\mathcal{G}_{ijk}^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^G(d_i d_j - \frac{1}{3}\delta_{ij})d_k + Y_{\alpha\beta}^G(d_i \delta_{jk} + d_j \delta_{ik} - 2d_i d_j d_k) \quad (6.61)$$

$$\mathcal{H}_{ijk}^{\alpha\beta} = Y_{\alpha\beta}^H(\epsilon_{ikl} d_l d_j + \epsilon_{jkl} d_l d_i) \quad (6.62)$$

$$\mathcal{M}_{ijkl}^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^M d_{ijkl}^{(0)} + Y_{\alpha\beta}^M d_{ijkl}^{(1)} + Z_{\alpha\beta}^M d_{ijkl}^{(2)} \quad (6.63)$$

et

$$d_{ijkl}^{(0)} = \frac{3}{2}(d_i d_j - \frac{1}{3}\delta_{ij})(d_k d_l - \frac{1}{3}\delta_{kl}) \quad (6.64)$$

$$d_{ijkl}^{(1)} = \frac{1}{2}(d_i \delta_{jl} d_k + d_j \delta_{il} d_k + d_i \delta_{jk} d_l + d_j \delta_{ik} d_l - 4d_i d_j d_k d_l) \quad (6.65)$$

$$d_{ijkl}^{(2)} = \frac{1}{2}(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{jk} \delta_{il} - \delta_{ij} \delta_{kl} + d_i d_j \delta_{kl} + d_k d_l \delta_{ij} - d_i d_k \delta_{jl} - d_j d_k \delta_{il} - d_i d_l \delta_{jk} - d_j d_l \delta_{ik} + d_i d_j d_k d_l) \quad (6.66)$$

Les corrections précédentes ne sont valables que pour la partie déviatorique du stresslet. Plus récemment, les expressions théoriques pour la pression particulaire Π ont également été proposées et s'écrivent (Jeffrey *et al.*, 1993)³²

$$\begin{pmatrix} \Pi_1 \\ \Pi_2 \end{pmatrix} = \eta \begin{bmatrix} \mathcal{P}^{11} & \mathcal{P}^{12} & \mathcal{Q}^{11} & \mathcal{Q}^{12} \\ \mathcal{P}^{21} & \mathcal{P}^{22} & \mathcal{Q}^{21} & \mathcal{Q}^{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_1) - \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{u}^\infty(\mathbf{x}_2) - \mathbf{U}_2 \\ \mathbf{E}^\infty \\ \mathbf{E}^\infty \end{pmatrix} \quad (6.67)$$

avec

$$\mathcal{P}_i^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^P d_i \quad (6.68)$$

$$\mathcal{Q}_{ij}^{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}^Q(d_i d_j - \frac{1}{3}\delta_{ij}) \quad (6.69)$$

La rotation des particules n'intervient pas car elle ne participe pas à la pression particulaire.

32. Notons que ces corrections de lubrification sont fournies pour $\Pi = tr(\mathbf{S})$ alors que l'on définit plutôt la pression particulaire par $-tr(\mathbf{S})/3$.

6.5.4 Modélisation par décomposition de la matrice de résistance

Comme il l'a déjà été évoqué, cette approche transpose à notre simulation directe une méthode récente employée dans le cadre de la FCM (Yeo et Maxey, 2010c), méthode elle-même inspirée de celle utilisée en dynamique stokésienne.

Pour la description de cette approche, notons \mathcal{U} le vecteur des vitesses de toutes les particules $\mathcal{U} = (\mathbf{U}, \mathbf{\Omega})^T$ et \mathcal{F} le vecteur des efforts hydrodynamiques exercés par le fluide sur les particules $\mathcal{F} = (\mathbf{F}, \mathbf{T})^T$. En régime de Stokes, la vitesse \mathcal{U} , solution du problème complet, peut s'écrire sous forme résistance par

$$\mathcal{F} = \mathcal{R}_{FU} \cdot (\mathcal{U}_\infty - \mathcal{U}) + \mathcal{R}_{FE} : \mathbf{E}_\infty \quad (6.70)$$

avec \mathcal{R}_{FU} et \mathcal{R}_{FE} des matrices de résistance non connues dans le cas général à plus de deux sphères. La vitesse non perturbée \mathcal{U}_∞ est la vitesse fluide qui serait obtenue en l'absence de particules. Notons que nous traitons ici un cas général à N_p particules et que les vecteurs de vitesse ou d'effort sont donc de dimension $6N_p$.

Par analogie, la solution approchée $\tilde{\mathcal{U}}$, obtenue par simulation, peut formellement s'exprimer sous cette même forme et vérifie

$$\mathcal{F} = \tilde{\mathcal{R}}_{FU} \cdot (\mathcal{U}_\infty - \tilde{\mathcal{U}}) + \tilde{\mathcal{R}}_{FE} : \mathbf{E}_\infty \quad (6.71)$$

Les matrices $\tilde{\mathcal{R}}_{FU}$ et $\tilde{\mathcal{R}}_{FE}$ ne sont en fait jamais explicitement calculées et traduisent l'ensemble de l'algorithme numérique de résolution.

L'approche numérique, avec les maillages utilisés, n'est pas capable de prendre en compte toutes les interactions proches de lubrification. S'inspirant de la dynamique stokésienne, on peut alors raisonnablement supposer la décomposition

$$\mathcal{R} \approx \tilde{\mathcal{R}} + \mathcal{R}^< \quad (6.72)$$

Cette relation suggère que la matrice de résistance exacte \mathcal{R} est la somme de la matrice de résistance explicitement résolue par le calcul $\tilde{\mathcal{R}}$ (et qui contient donc toutes les interactions de champ lointain) et d'une matrice sous-maille³³ $\mathcal{R}^<$ qui contient toutes les interactions de champ proche qui ne peuvent pas être résolues avec les maillages utilisés. Nous reviendrons sur cette matrice sous-maille par la suite.

En combinant Eq. (6.70), Eq. (6.71) et Eq. (6.72), on peut exprimer la vitesse recherchée exacte \mathcal{U} en fonction de la vitesse approximée numériquement $\tilde{\mathcal{U}}$ par

$$\mathcal{U} = \tilde{\mathcal{U}} + \tilde{\mathcal{R}}_{FU}^{-1} \cdot [\mathcal{R}_{FU}^< \cdot (\mathcal{U}_\infty - \mathcal{U}) + \mathcal{R}_{FE}^< : \mathbf{E}_\infty] \quad (6.73)$$

Cette dernière équation traduit de manière formelle le fait de rajouter l'interaction $\mathcal{F}_{lub} = (\mathbf{F}_{lub}, \mathbf{T}_{lub})^T$ dans l'algorithme numérique avec

$$\mathcal{F}_{lub} = \mathcal{R}_{FU}^< \cdot (\mathcal{U}_\infty - \mathcal{U}) + \mathcal{R}_{FE}^< : \mathbf{E}_\infty \quad (6.74)$$

Cette force constitue en quelque sorte la portion des interactions hydrodynamiques qui n'a pas été résolue par l'approche numérique.

Implémentation numérique

D'un point de vue formel, les équations de Newton permettant de calculer les vitesses des particules peuvent s'écrire

$$\mathbf{M} \cdot \frac{d\mathcal{U}}{dt} = \mathcal{F}_h + \mathcal{F}_c + \mathcal{F}_{lub} \quad (6.75)$$

33. Terme non consacré emprunté au domaine de la turbulence, plus précisément à la simulation des grandes échelles, où existe une problématique similaire dont le cœur est cette notion d'échelle résolue/non-résolue.

avec \mathcal{F}_h les interactions hydrodynamiques effectivement résolues (en y incluant la gravité), \mathcal{F}_c les interactions de contact, \mathcal{F}_{lub} les interactions de lubrification données par Eq. (6.74) et \mathbf{M} la matrice de masse/inertie généralisée. Les interactions de lubrification dépendent très fortement de la configuration des particules et ne sont que faiblement couplées avec les interactions hydrodynamiques à longue portée, ce qui justifie un splitting de Eq. (6.75) en

$$\mathbf{M} \cdot \frac{\tilde{\mathcal{U}} - \mathcal{U}^n}{\Delta t} = \mathcal{F}_h + \mathcal{F}_c \quad (6.76)$$

$$\mathbf{M} \cdot \frac{\mathcal{U}^{n+1} - \tilde{\mathcal{U}}}{\Delta t} = \mathcal{F}_{lub} \quad (6.77)$$

La première étape Eq. (6.76) n'est qu'une réécriture formelle de la procédure numérique générale permettant de calculer la vitesse des particules à l'itération $n+1$. La seconde étape Eq. (6.77) a pour objectif de corriger cette vitesse $\tilde{\mathcal{U}}$ en y incorporant l'effet de la lubrification. Comme les forces de lubrification sont singulières au contact, le système Eq. (6.77) est raide et doit être résolu implicitement en utilisant $\mathcal{F}_{lub}(\mathcal{U}^{n+1})$, ce qui aboutit avec Eq. (6.74) à

$$\left[\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \mathcal{R}_{FU}^< \right] \cdot \mathcal{U}^{n+1} = \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \cdot \tilde{\mathcal{U}} + \mathcal{R}_{FU}^< \cdot \mathcal{U}_\infty + \mathcal{R}_{FE}^< : \mathbf{E}_\infty \quad (6.78)$$

A partir de la valeur calculée des vitesses $\tilde{\mathcal{U}}$, les nouvelles vitesses corrigées de la lubrification \mathcal{U}^{n+1} sont obtenues par la résolution de ce système linéaire Eq. (6.78).

La matrice $\mathbf{M}\Delta t^{-1} + \mathcal{R}_{FU}^<$ étant creuse (i.e., ne contenant que peu de termes non nuls) et symétrique, le système Eq. (6.78) peut avantageusement être inversé via des algorithmes itératifs comme la méthode du gradient conjugué. Ces techniques itératives fonctionnent toutefois bien dès lors que la matrice à inverser est bien conditionnée, ce qui n'est clairement pas toujours le cas. Les valeurs propres peuvent en effet être très disparates du fait de la présence simultanée de termes singuliers en $\mathcal{O}(\xi^{-1})$ et de termes non-singuliers en $\mathcal{O}(1)$, avec ξ la distance surface-à-surface adimensionnée. Lorsque les particules sont très proches ($\xi \rightarrow 0$), le conditionnement de la matrice se dégrade et la convergence de la méthode en est fortement affectée. Il est alors nécessaire de recourir à un préconditionnement du système : dans notre cas, le choix s'est porté sur une factorisation incomplète de Choleski. Pour améliorer encore les performances du gradient conjugué préconditionné, une renumérotation de la matrice à inverser $\mathbf{M}\Delta t^{-1} + \mathcal{R}_{FU}^<$ est effectuée grâce à un algorithme de type RCM (Reverse Cuthill-McKee). Le lecteur avide d'en savoir un peu plus pourra consulter l'annexe A où sont distillés quelques détails techniques supplémentaires. Malgré ceci, une approche itérative préconditionnée ne fonctionne correctement que lorsque le conditionnement n'est pas trop dégradé. Pour éviter ces cas, la distance interparticulaire surface-à-surface est seuillée à $10^{-6}a$ dans le système à résoudre, un choix également adopté par Sierou et Brady (2001). Des particules peuvent toujours s'approcher à une distance plus faible mais la correction de lubrification, obtenue par inversion du système Eq. (6.78), se comportera comme si ces dernières n'étaient distantes que de $10^{-6}a$. Cet artifice n'induit qu'un biais minime et permet de calculer efficacement des configurations ingérables numériquement (comme les cas $\xi < 0$).

Détermination de la matrice sous-maille

Il reste pour terminer à spécifier les matrices sous-maille $\mathcal{R}^<$. Ces dernières sont censées représenter la part des interactions à courte portée qui ne peut pas être captée par le modèle numérique. L'idée est de les estimer en comparant les solutions théoriques exactes et les solutions calculées par le code sans aucun modèle de lubrification. Le cas de comparaison est celui de deux sphères qui est le seul connu théoriquement. Ceci s'écrit via Eq. (6.72) :

$$\mathcal{R}^< = \mathcal{R}_{2B} - \tilde{\mathcal{R}}_{2B} \quad (6.79)$$

L'hypothèse d'additivité par paires est ici sous-entendue. En effet, cette matrice de résistance sous-maille $\mathcal{R}^<$ qui sera utilisée dans le cas général à N_p particules est en fait calée sur le cas, analytiquement connu, à deux particules.

Une autre hypothèse est que les tenseurs $\tilde{\mathcal{R}}_{2B}$ et $\mathcal{R}^<$ possèdent la même forme fonctionnelle que l'expression théorique \mathcal{R}_{2B} donnée par Eq. (6.54). Ainsi, seules les fonctions scalaires de résistance (\tilde{X}_{11}^A , \tilde{X}_{12}^A , \tilde{Y}_{12}^A , etc...) vont être estimées pour différentes configurations puis tabulées en fonction de la distance interparticulaire réduite ξ . Les calculs préliminaires et les tabulations de ces différentes fonctions scalaires $\tilde{X}(\xi)$ et $\tilde{Y}(\xi)$ sont faits une fois pour toutes. La manière employée ici pour estimer ces fonctions scalaires consiste à coupler le modèle numérique complet à une routine d'optimisation (simplexe de Nelder-Mead). Cette optimisation se fait simultanément sur toutes les fonctions scalaires et cherche à déterminer les fonctions permettant de minimiser l'écart entre prédiction numérique et solution de référence théorique sur divers configurations à deux sphères (différentes distances et orientations). Le résultat de cette minimisation fournit ainsi les valeurs des fonctions scalaires permettant d'approcher au mieux le cas théorique à deux sphères. Un exemple de résultat de cette procédure est fourni en Fig. 6.8 qui présente, en fonction de la distance adimensionnée $\xi = ||\mathbf{r}||/a - 2$, la fonction de résistance théorique exacte X_{11}^A et numérique \tilde{X}_{11}^A . Cette dernière fonction est censée traduire la partie de l'interaction effectivement captée par le modèle seul, sans correction de lubrification.

Il apparaît que pour une distance entre particules supérieure à $0,2a$ (soit sensiblement une taille de maille ici), les deux fonctions coïncident, signe que le code de calcul est capable dans ce cas de prendre en compte toutes les interactions hydrodynamiques sans avoir recours à un modèle de lubrification additionnel. Au fur et à mesure que les particules se rapprochent, le modèle numérique ne parvient à capter qu'une partie des interactions à courte portée et l'on sous-estime alors la fonction de résistance. Dans ce cas, c'est bien la différence $X_{11}^{A,<} = X_{11}^A - \tilde{X}_{11}^A$ qu'il est nécessaire d'intégrer dans la matrice sous-maille pour retrouver la solution exacte.

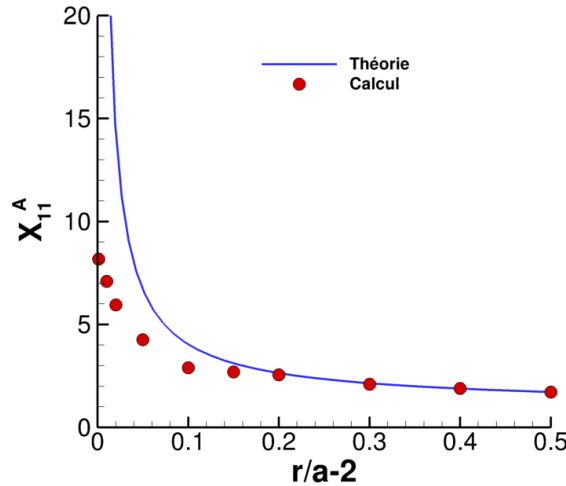


Fig. 6.8 – Fonctions de résistance théorique X_{11}^A et numérique \tilde{X}_{11}^A selon la distance $\xi = ||\mathbf{r}||/a - 2$. La différence représente la correction de lubrification qu'il faudra ajouter.

Correction des contraintes particulières

Le tenseur des contraintes particulières³⁴ doit également être corrigé des effets de lubrification. Cette correction se décompose en plusieurs étapes : le déviateur de la partie symétrique (stresslet), la partie antisymétrique (rotlet) et la trace (pression particulière), le tout en suivant une approche calquée sur celle des vitesses.

Le déviateur du stresslet hydrodynamique \mathbf{S}^h peut s'écrire sous forme résistance par

$$\mathbf{S}^h = \mathcal{R}_{SU} \cdot (\mathcal{U}_\infty - \mathcal{U}) + \mathcal{R}_{SE} : \mathbf{E}_\infty \quad (6.80)$$

et, de la même manière, peut être décomposé en une partie $\tilde{\mathbf{S}}^h$ explicitement résolue par l'approche numérique et une autre, sous-maille, liée aux forces de lubrification non-résolues :

$$\mathbf{S}^h = \tilde{\mathbf{S}}^h + \mathcal{R}_{SU}^< \cdot (\mathcal{U}_\infty - \mathcal{U}) + \mathcal{R}_{SE}^< : \mathbf{E}_\infty \quad (6.81)$$

avec $\tilde{\mathbf{S}}^h$ le stresslet résolu dont le déviateur s'écrit d'après Eq. (6.50)

$$\tilde{\mathbf{S}}^h = -\frac{\rho_f}{2} \int_{\mathcal{D}} (\boldsymbol{\lambda} \otimes \mathbf{x} + \mathbf{x} \otimes \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{I} [\frac{2}{3} \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{x}]) \, d\mathbf{x} \quad (6.82)$$

Notons qu'à ce stade les vitesses exactes \mathcal{U} sont connues et peuvent donc être utilisées dans l'expression précédente Eq. (6.81). Les fonctions scalaires de résistance associées aux matrices sous-maille $\mathcal{R}_{SU}^<$ and $\mathcal{R}_{SE}^<$ sont obtenues et tabulées de la même manière que pour la vitesse.

La partie antisymétrique (rotlet) liée à la lubrification peut s'écrire simplement à partir des couples \mathbf{T}^{lub} de lubrification :

$$\mathbf{T}^h = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{T}^{lub} \quad (6.83)$$

L'expression est ici donnée pour une paire et le rotlet total est obtenu par sommation paire à paire.

Enfin, et comme pour le stresslet, la partie hydrodynamique de la pression particulière va se décomposer en

$$\Pi^h = \tilde{\Pi}^h + \mathcal{R}_{\Pi U}^< \cdot (\mathcal{U}_\infty - \mathcal{U}) + \mathcal{R}_{\Pi E}^< : \mathbf{E}_\infty \quad (6.84)$$

avec de la même façon, une tabulation des fonctions de résistance sous-maille (fonctions P et Q).

Interactions avec les parois

Les interactions de lubrification entre une particule et une paroi doivent également être prises en compte. La méthode de lubrification employée se transpose aisément au cas de l'interaction particule/paroi. D'un point de vue théorique, l'interaction de lubrification particule/paroi est toujours donnée par l'expression pour deux sphères Eq. (6.54) mais dans laquelle tous les termes (12), (21) et (22) sont annulés. Les fonctions de résistance théoriques fournies par Eq. (6.55) *et sqq.* sont toujours valides mais avec des expressions différentes pour les fonctions scalaires. Les développements asymptotiques en champ proche de ces fonctions scalaires sont reportés dans l'annexe B et sont tirés de Yeo et Maxey (2010b) qui ont recoupé et compilé différentes sources bibliographiques. Un point important toutefois est que certaines fonctions liées à la contrainte particulière ne sont pas disponibles dans la littérature : il s'agit plus particulièrement des fonctions X^G , Y^M et X^P (les fonctions X^M , Z^M et X^Q n'intervenant pas pour une interaction particule/paroi plane). Le rôle d'une paroi sur les contraintes particulières n'a donc manifestement pas déchaîné les passions malgré son effet non négligeable. Sangani *et al.* (2011) montrent en effet qu'au contact d'une paroi, le stresslet d'une particule cisailée pouvait être 4,2 fois plus important qu'en l'absence de paroi.

34. ou plus exactement sa partie hydrodynamique car les contacts induisent également une contribution à ce tenseur des contraintes comme nous le verrons ultérieurement.

Nous proposons un développement asymptotique en champ proche pour les trois fonctions manquantes dans le but de pouvoir obtenir les solutions théoriques d'une interaction particule/paroi. Pour ce faire, nous partons simplement des expressions théoriques pour deux particules de taille différente (Jeffrey, 1992; Jeffrey *et al.*, 1993; Kim et Karrila, 1991) en faisant tendre le rapport de taille β vers l'infini. Le terme non-singulier en $\mathcal{O}(1)$ est tiré de Jeffrey (1992) pour $\beta = 100$. Les expressions asymptotiques proposées sont

$$\begin{aligned} X^G &= 4\pi a^2 \left(\frac{3}{2} \xi^{-1} + \frac{6}{5} \ln \xi + 0,268 \right) \\ X^P &= 4\pi a^2 \left(\frac{3}{2} \xi^{-1} + \frac{6}{5} \ln \xi - 0,552 \right) \\ Y^M &= \frac{20}{3} \pi a^3 \left(-\frac{24}{25} \ln \xi - \frac{1182}{625} \xi \ln \xi - 0,685 \right) \end{aligned}$$

Cette dernière expression permet de retrouver les résultats théoriques de Sangani *et al.* (2011) pour le stresslet d'une particule en proche paroi.

La procédure générale de correction de lubrification reste identique et consiste encore une fois à identifier la partie numériquement résolue, partie qui servira à construire les matrices sous-maille correspondantes pour le cas particule/paroi. La modélisation détaillée de la lubrification aux parois dans un code de simulation semble avoir été peu traitée dans sa totalité. Les travaux de Yeo et Maxey (2010b) semblent les plus aboutis bien qu'ils n'aient pas modélisé précisément l'impact de la paroi sur le stresslet ou la pression particulaire.

Barrière de lubrification

La procédure de correction de lubrification n'est pas appliquée à toutes les particules. Quand deux particules sont suffisamment éloignées, notre méthode de résolution des équations de (Navier-) Stokes calcule correctement et explicitement l'ensemble des interactions hydrodynamiques. Ce traitement spécifique de lubrification n'est donc activé que lorsque la distance adimensionnée entre les surfaces des particules est plus petite qu'un certain seuil noté ξ_{lub} (et que les utilisateurs de la FCM appellent également « barrière de lubrification »). Sa valeur dépend du modèle numérique et ne s'estime que par comparaison entre simulations et solutions analytiques. Nous avons déjà vu en Figure 6.8 (et nous y reviendrons également dans les validations effectuées par la suite) que notre approche par domaine fictif permet de résoudre correctement les interactions hydrodynamiques tant que les distances interparticulaires sont supérieures à la taille de la maille, soit en adimensionné : $\xi_{lub} \approx \Delta/a$. Pour les maillages typiquement utilisés, un ordre de grandeur est $\xi_{lub} \approx 0,2$, une valeur couramment retrouvée dans d'autres méthodes.

Il s'agit alors de déterminer ce que nous appelons un amas lubrifié, c'est-à-dire un amas de particules ayant au moins un voisin à une distance inférieure à ξ_{lub} . Dans les cas concentrés, où les particules sont très proches, il peut n'y avoir qu'un seul amas lubrifié : dans ce cas, la lubrification couple simultanément le mouvement de toutes les particules. La matrice de résistance atteint sa taille maximale $6N_p \times 6N_p$. Dans les cas plus dilués, il existe plusieurs amas de taille plus petite. Toutes les vitesses sont couplées par la correction de lubrification au sein de chaque amas lubrifié et les amas interagissent entre eux via les interactions hydrodynamiques explicitement résolues. Un exemple illustratif de détection d'amas lubrifiés est présenté en Fig. 6.9. Un algorithme spécifique a été écrit pour les identifier. A chaque couleur correspond un amas lubrifié ; les particules isolées (i.e., n'appartenant à aucun amas) ne sont pas représentées ici pour des soucis de clarté. Notons que le triplet vert en bas à gauche du domaine est connecté via la condition de périodicité à la particule verte isolée en bas à droite.

Des limites existent toutefois pour ce modèle de correction de lubrification du fait de la théorie autour de laquelle il s'articule : la théorie de la lubrification n'est en effet valable que pour des sphères.

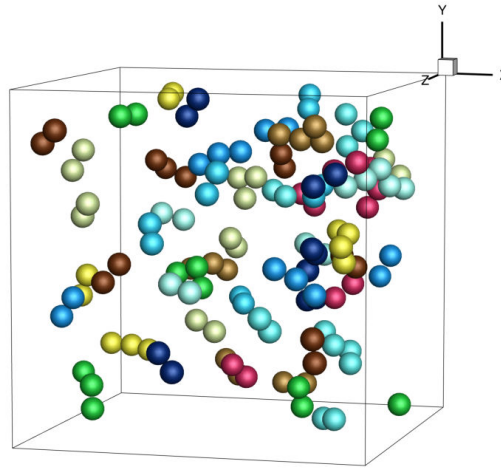


Fig. 6.9 – Illustration de détection d'amas lubrifiés : à chaque couleur correspond un amas.

Le cas de sphères de tailles différentes reste gérable et les expressions théoriques, qui sont disponibles dans la littérature (Kim et Karrila, 1991), ont été intégrées dans notre code. Seules manqueraient les fonctions scalaires sous-maille qu'il resterait à évaluer par simulation. Par contre, le cas de particules non-sphériques ou de fluide non-newtonien ne peut pas être traité rigoureusement du fait du manque de théorie de lubrification associée. Pour les particules ellipsoïdales, de premiers travaux ont été proposés (Claeys et Brady, 1989, 1993). Ils restent cependant incomplets (absence des termes en $\mathcal{O}(1)$ et des fonctions liées au stresslet) et de formulation extrêmement complexe.

6.6 Forces de contact

6.6.1 Modélisation : petit tour bibliographique

Les forces de lubrification n'empêchent théoriquement les particules de rentrer en contact que pour deux sphères parfaitement lisses, rigides et non-inertiels. Même dans ce cas, les simulations en écoulement cisaillé attestent de contacts voire même de recouvrements entre particules, un régime qualifié de « pathologique » par Melrose et Ball (1995). Du point de vue physique, le contact a effectivement lieu en dépit de la lubrification en particulier du fait de la rugosité des particules. Du point de vue numérique par contre, l'existence d'un pas de temps discret peut favoriser le contact et rendre possible les recouvrements entre particules. Afin d'éviter ces situations non-physiques de recouvrement ainsi que de modéliser la situation – physique – du contact, différentes voies sont possibles. Le choix est pour autant délicat car selon la stratégie employée (force de répulsion ou modification des vitesses précollisionnelles), Dance *et al.* (2004) montrent que l'effet sur la microstructure peut être assez marqué, même si ces comparaisons sont réalisées dans le cadre d'une sédimentation en régime dilué. Des approches purement mathématiques sont quelquefois employées (Lefebvre, 2009; Maury, 1997; Verdon *et al.*, 2011). Il s'agit dans ce cas de définir un espace de vitesses admissibles garantissant l'absence de recouvrement à l'itération suivante et de contraindre les vitesses à rester dans cet espace. Si cette stratégie permet efficacement d'éviter les recouvrements, elle ne modélise pas la physique du contact.

Le choix le plus répandu consiste à activer une force de répulsion quand les particules sont suffisamment proches. Les caractéristiques de cette force jouent un rôle assez marqué sur la suspension, en particulier sa microstructure et sa rhéologie (Bricker et Butler, 2006; Dance *et al.*, 2004; Drazer *et al.*, 2002; Sierou et Brady, 2002; Yeo et Maxey, 2010b). Dans le cadre de simulations des suspensions, donc principalement en dynamique stokésienne et en FCM, la modélisation de cette répulsion se fait via un potentiel *ad hoc* motivé par des raisons pratiques plutôt que physiques. En

dynamique stokésienne, cette force interparticulaire s'apparente à une répulsion électrostatique et s'écrit

$$\mathbf{F} = F_0 \frac{\tau e^{-\tau \xi}}{1 - e^{-\tau \xi}} \frac{\mathbf{r}}{\|\mathbf{r}\|} \quad (6.85)$$

où \mathbf{r} est le vecteur branche entre les deux particules et ξ la distance interparticulaire adimensionnée. Cette force est caractérisée par son amplitude F_0 et une portée τ^{-1} , assimilable à une longueur de Debye. Dénués de valeurs physiques claires dans le cadre de suspensions non-colloïdales, ces paramètres sont laissés au libre arbitre de l'utilisateur malgré un effet sensible sur la rhéologie (Sierou et Brady, 2002). Les simulations en FCM utilisent plutôt une force de répulsion de type

$$\mathbf{F} = F_0 \left(\frac{R_{ref}^2 - \mathbf{r}^2}{R_{ref}^2 - 4a^2} \right)^6 \frac{\mathbf{r}}{\|\mathbf{r}\|} \quad (6.86)$$

activée dès lors que la distance entre particules est inférieure à la valeur R_{ref} . Ce modèle pose les mêmes questions sur le choix des paramètres ainsi que sur la nécessité de recourir à une modélisation plus physique du contact.

6.6.2 Méthode des éléments discrets (DEM)

La voie proposée ici est de recourir à un modèle un peu plus réaliste du contact, même s'il est évident que la modélisation fine et détaillée de cet aspect reste complexe et sort largement du cadre de ce travail. Pour ce faire, une méthode des éléments discrets (*Discrete Element Method* ou DEM) est choisie. Cette approche regroupe en fait plusieurs variantes (voir Radjaï et Dubois (2010) ou Pöschel et Schwager (2005) pour une revue) et la plus commune est celle de dynamique moléculaire développée à la fin des années 1970 (Cundall et Strack, 1979).

La méthode DEM est très largement employée pour la simulation des milieux granulaires secs et c'est aussi ce qui explique ce choix. En effet, les suspensions concentrées sous faible cisaillement sont souvent en régime frictionnel et se comportent alors plutôt comme un granulaire sec comme le montre un certain nombre d'expériences (Huang *et al.*, 2005; Lombois *et al.*, 2005; Ovarlez *et al.*, 2006). Dans une suspension très concentrée, un déplacement local d'une particule implique généralement des déplacements concertés d'un grand nombre de particules avec notamment des efforts normaux importants liés à la dilatance, exactement comme dans un granulaire sec (Lombois *et al.*, 2005). C'est pour cette raison que les méthodes couplant DNS et DEM ont commencé récemment à voir le jour (Feng *et al.*, 2010; Mansouri *et al.*, 2009; Simeonov et Calantoni, 2012; Wachs, 2009). En modélisant plus finement les interactions de contact, il devient possible de se rapprocher du comportement réel des particules. C'est par exemple le cas d'une paire de particules en interaction proche dans un fluide : malgré la lubrification, il y a contact puis dans un premier temps un roulement suivi d'un roulement partiel avec glissement (Ekiel-Jezewska *et al.*, 1999). Une modélisation trop simple, par exemple basée sur un potentiel de répulsion, ne parviendrait pas à traduire cette combinaison de roulement et glissement (Davis *et al.*, 2003).

Par souci de clarté, la méthode est présentée pour des sphères ; l'extension à des particules non-sphériques pourra être trouvée par ailleurs (Pöschel et Schwager, 2005; Radjaï et Dubois, 2010; Wachs, 2009). L'approche DEM consiste à considérer le milieu granulaire comme une assemblée de particules discrètes interagissant à travers des efforts de contact. Soit une paire de particules \mathcal{P}_i et \mathcal{P}_j en contact, de rayons a_i et a_j , et soit $\mathbf{r} = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i$ le vecteur branche. La force de contact \mathbf{F}^c exercée par \mathcal{P}_j sur \mathcal{P}_i se décompose classiquement en ses composantes normale et tangentielle :

$$\mathbf{F}^c = \mathbf{F}_n^c + \mathbf{F}_t^c \quad (6.87)$$

Dans les modèles les plus simples, la force normale s'écrit comme la somme d'une contribution élastique, proportionnelle à la distance de recouvrement $\delta = \|\mathbf{r}\| - a_i - a_j$, et d'une contribution

visqueuse, proportionnelle à la vitesse relative, et qui traduit la dissipation d'énergie lors du contact :

$$\mathbf{F}_n^c = [-K_n \delta - \gamma_n \frac{d\delta}{dt}] \cdot \mathbf{n} \quad (6.88)$$

où K_n et γ_n sont respectivement la raideur normale et le coefficient d'amortissement normal. La normale unitaire est définie par $\mathbf{n} = \mathbf{r} / \|\mathbf{r}\|$.

La force tangentielle obéit à une relation similaire :

$$\mathbf{F}_t^c = -K_t \Upsilon - \gamma_t \frac{d\Upsilon}{dt} \quad (6.89)$$

La grandeur vectorielle Υ est assimilable à la longueur d'un ressort tangentiel et est obtenue en intégrant la vitesse de glissement \mathbf{U}^s tout au long du contact, de durée t_c

$$\Upsilon = \int_0^{t_c} \mathbf{U}^s dt \quad (6.90)$$

avec la vitesse de glissement

$$\mathbf{U}^s = \mathbf{U}_i - \mathbf{U}_j - [(\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_j) \cdot \mathbf{n}] \cdot \mathbf{n} + (a_i \boldsymbol{\Omega}_i + a_j \boldsymbol{\Omega}_j) \wedge \mathbf{n} \quad (6.91)$$

Comme le plan tangent est susceptible d'évoluer au cours du contact, la force tangentielle obtenue est reprojétée sur le plan tangent à chaque itération

$$\mathbf{F}_t^c = \mathbf{F}_t^c - (\mathbf{F}_t^c \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} \quad (6.92)$$

La prise en compte du frottement se fait en utilisant la loi d'Amontons-Coulomb. La force tangentielle est alors seuillée par la limite de friction $\mu_d \|\mathbf{F}_n^c\|$, soit

$$\mathbf{F}_t^c = \mu_d \|\mathbf{F}_n^c\| \frac{\mathbf{F}_t^c}{\|\mathbf{F}_t^c\|} \quad (6.93)$$

où μ_d représente le coefficient de frottement dynamique. Il n'y a pas de prise en compte d'un coefficient de frottement statique.

Cette force de contact va donner lieu à un couple de contact \mathbf{T}^c sur la particule i fourni par

$$\mathbf{T}^c = a_i \mathbf{n} \wedge \mathbf{F}^c \quad (6.94)$$

ainsi qu'à un stresslet de contact \mathbf{S}^c qui s'exprime pour la particule i par

$$\mathbf{S}^c = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^c \otimes a_i \mathbf{n} + a_i \mathbf{n} \otimes \mathbf{F}^c) \quad (6.95)$$

Ce tenseur est de trace non-nulle et sa trace détermine la contribution du contact à la pression particulaire. De plus, comme $\mathbf{F}^c \otimes \mathbf{r}$ n'est pas symétrique, il existe une contribution antisymétrique du contact à la contrainte particulaire qui est liée au couple de contact.

Modélisation de la rugosité

Le rôle important des rugosités de surface justifie une modélisation adaptée. Considérons une particule sphérique de rayon a et constellée d'aspérités dispersées de taille h_{rug} . Une approche simple proposée par Smart et Leighton (1989) consiste à supposer que le contact entre sphères s'opère à travers les rugosités et que, par conséquent, le contact a lieu dès lors que la distance h entre surface des particules est plus petite que h_{rug} . Ceci revient à définir une distance effective $h' = h - h_{rug}$ pour

déterminer le contact (voir Figure 6.10). Les forces de lubrification sont cependant toujours calculées avec la distance $h=h' + h_{rug}$ car il est supposé que l'écoulement du fluide interstitiel n'est pas fondamentalement modifié par la présence des rugosités. La pertinence de cette hypothèse semble confirmée expérimentalement par des mesures basées sur un dispositif utilisant un microscope à force atomique (Vinogradova et Yakubov, 2003, 2006). La force normale de lubrification varie alors selon une loi en $1/(h' + h_{rug})$.

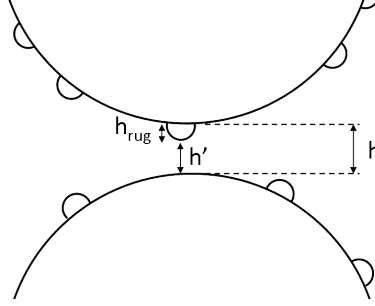


Fig. 6.10 – Schéma de deux sphères rugueuses en interaction. Le contact est défini par $h' \leq 0$.

Du point de vue du modèle, il s'agit de définir le contact dès lors que $h' \leq 0$. Le calcul des forces de contact s'effectue avec une distance de recouvrement modifiée définie par

$$\delta = \|\mathbf{r}\| - a_i - a_j - h_{rug} \quad (6.96)$$

6.6.3 Choix des paramètres physiques du modèle DEM

Raideur normale

La raideur normale K_n peut être choisie constante (modèle de Kelvin-Voigt). Dans ce cas, une valeur suffisamment élevée permettra de reproduire le comportement d'un matériau rigide. Ce dernier choix reste très répandu. Il est également possible de relier cette raideur aux propriétés mécaniques du matériau, en particulier son module d'Young E et son coefficient de Poisson ν , et c'est cette approche qui est retenue ici. Pour deux sphères de rayon a et h_{rug} (avec $h_{rug} \ll a$) en déformation élastique et quasi-statique, Hertz (1882) démontre que

$$K_n(\delta) = \frac{4}{3} h_{rug}^{1/2} E^* |\delta|^{1/2} \quad (6.97)$$

avec $E^* = E/2(1 - \nu^2)$. La théorie de Hertz signifie donc que la force normale évolue en $|\delta|^{3/2}$.

Pour des matériaux rigides toutefois, la raideur ainsi calculée peut être très élevée, ce qui n'est pas sans poser des problèmes numériques obligeant à réduire notablement le pas de temps. Pour contourner cette limitation, il est courant de se fixer un module E^* un peu plus faible que la réalité physique. Celui-ci peut être obtenu en se fixant a priori une déformation moyenne de la rugosité $\bar{\epsilon} = |\bar{\delta}|/h_{rug}$. En égalant cette force de contact avec une estimation de la force hydrodynamique en régime dilué, nous obtenons $6\pi\eta a^2 \dot{\gamma} = K_n(\delta)\delta$ avec $\delta = \bar{\epsilon} h_{rug}$ et $K_n(\delta)$ fourni par Eq. (6.97). En introduisant la rugosité adimensionnée $\xi_{rug} = h_{rug}/a$, cette égalité conduit à

$$\bar{\epsilon} = \left(\frac{9\pi\eta\dot{\gamma}}{2E^* \xi_{rug}^2} \right)^{2/3} \quad (6.98)$$

Pour un contact de Hertz, cette déformation s'avère donc indépendante de la taille a de la particule. A titre d'exemple, pour des particules de PMMA³⁵ ($E \approx 2$ GPa, $\nu \approx 0,4$) ayant une rugosité $\xi_{rug} = 10^{-2}$

³⁵. Ce choix s'explique par le large emploi de ce matériau dans les suspensions modèles, suspensions pour lesquelles des résultats expérimentaux sont disponibles dans la littérature.

dans un fluide $\eta = 1 \text{ Pa.s}$ et pour un cisaillement $\dot{\gamma} = 1 \text{ s}^{-1}$, la déformation $\bar{\epsilon}$ obtenue est très faible, de l'ordre de 2.10^{-3} .

Concrètement, nous imposerons une déformation moyenne de la rugosité $\bar{\epsilon}$ un peu plus grande (de l'ordre de quelques %) afin de limiter les problèmes numériques et déduirons la valeur de E^* en inversant Eq. (6.98). L'effet de ce choix sera évalué dans les simulations ultérieures. Dans tous les cas, une application directe de la théorie hertzienne Eq. (6.97) est également critiquable (domaine élastique, sphères sans rugosités,...), ce qui légitime que nous ayons pris ici une certaine liberté en réduisant artificiellement la rigidité. L'objectif des travaux est avant tout de recourir à une modélisation un peu plus physique et n'a pas la prétention de traiter ce problème complexe de mécanique du contact.

L'importance des forces de contact par rapport aux forces hydrodynamiques peut être évaluée par le paramètre $\dot{\Gamma}$, qui est analogue à un nombre de Péclet

$$\dot{\Gamma} = \frac{6\pi\eta a^2 \dot{\gamma}}{F_0} \quad (6.99)$$

où F_0 est une mesure de l'amplitude de la force de contact. Un choix possible pour F_0 est la force nécessaire à déformer complètement une rugosité, soit $F_0 = K_n(h_{rug})h_{rug}$. Avec ce choix, on a directement

$$\dot{\Gamma} = \bar{\epsilon}^{3/2} \quad (6.100)$$

Puisque $\bar{\epsilon}$ est fixé, la contribution relative du contact est identique quelle que soit la rugosité. La pertinence physique d'un $\dot{\Gamma}$ constant reste discutable et son effet sera abordé ultérieurement. Le rôle de ce paramètre, sur le rhéoépaississement notamment, a été étudié dans d'autres travaux, par ex. Seto *et al.* (2013) pour des systèmes très denses.

Raideur tangentielle

La modélisation de la force tangentielle est plus délicate et a donné lieu à différents modèles de complexité variable (Pöschel et Schwager, 2005; Walton et Braun, 1986; Zhang et Vu-Quoc, 2002). Un des modèles parmi les plus courants et les plus simples a été proposé par Mindlin (1949) et étend les travaux de Hertz au cas tangentiel (théorie de Hertz-Mindlin). Pour un matériau élastique, cette théorie lie le rapport des raideurs par

$$\frac{K_t}{K_n} = \frac{2-2\nu}{2-\nu} \quad (6.101)$$

ce qui fournit pour les coefficients de Poisson usuels ($\nu \sim 0,3-0,5$), des rapports de raideur K_t/K_n autour de 0,7-0,8. Ces valeurs sont toutefois peu rencontrées et le choix $K_t/K_n = 2/7$ est le plus répandu et s'accorde mieux avec les données expérimentales (Shäfer *et al.*, 1996; Silbert *et al.*, 2001). C'est ce choix qui sera adopté ici.

Coefficient de dissipation

La théorie de Hertz peut être étendue en intégrant la viscoélasticité du matériau qui est la cause de la composante dissipative de la force de contact (voir par exemple Hertzsch *et al.* (1995)). Cela aboutit toutefois à des expressions complexes dont l'utilité est peu légitime ici. Un choix répandu consiste à considérer un paramètre d'amortissement γ_n constant. Cette grandeur étant mal connue, il est plus pratique de l'exprimer en fonction du coefficient de restitution normal e (rapport des vitesses normales pré- et post-collisionnelles) qui est plus facile à caractériser expérimentalement. En définissant le paramètre d'amortissement $\kappa = \gamma_n / \gamma_n^{cr}$ où $\gamma_n^{cr} = 2\sqrt{K_n M}$ est l'amortissement critique et M la masse de la particule, le coefficient de restitution normal s'écrit

$$e = \exp\left(\frac{-\pi\kappa}{\sqrt{1-\kappa^2}}\right) \quad (6.102)$$

d'où la relation

$$\kappa = -\frac{\ln e}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e}} \quad (6.103)$$

Pour un coefficient e fixé, cette dernière expression permet de calculer κ puis γ_n . Un autre choix courant, également fait ici, est d'imposer $\gamma_t = \gamma_n$.

Pour les contacts à faibles vitesses, le coefficient de restitution e est généralement de l'ordre de 1, ce que confirme un grand nombre d'expériences, par exemple Labous *et al.* (1997). Ceci signifie que pour les suspensions à faibles Reynolds, il est anticipé que la dissipation mécanique pendant le contact est négligeable. De plus, pour des contacts lubrifiés à faibles nombres de Stokes, la majeure partie de l'énergie dissipée se fait via la lubrification (Gondret *et al.*, 2002; Simeonov et Calantoni, 2012), ce qui réduit d'autant le rôle attendu de la dissipation mécanique. Ce point sera néanmoins étudié dans les simulations ultérieures.

6.6.4 Aspects numériques

A chaque itération, il est tout d'abord nécessaire de détecter toutes les paires de particules en contact. L'efficacité de cette opération est grandement améliorée par l'emploi de listes de Verlet (Verlet, 1967). Les forces et couples de contact \mathbf{F}^c et \mathbf{T}^c sont ensuite calculés puis intégrés de manière explicite via Eq. (6.38) et Eq. (6.39) afin de déterminer les nouvelles valeurs des vitesses particulières.

Une remarque concerne les pas de temps puisque les forces de contact sont ici intégrées de manière explicite. En DEM « classique » (i.e., en granulaire sec), le pas de temps Δt doit rester très petit, typiquement quelques centièmes du temps caractéristique de collision τ_{coll} . Dans le cas où la raideur K_n est constante et avec une dissipation mécanique négligée (tout ceci afin de simplifier l'analyse), ce temps s'écrit $\tau_{coll} = (M/K_n)^{1/2}$. Comme le contact est finalement modélisé par un système masse-ressort, cette quantité apparaît naturellement comme la constante de temps de l'équation différentielle $M\ddot{\delta} + K_n\delta = f$ (où f englobe toutes les forces autres que le contact). Ceci n'est plus tout à fait vrai en présence de fluide. Pour un contact lubrifié, qui est principalement contrôlé par la dissipation visqueuse, ce système est maintenant plutôt décrit par l'équation $M\ddot{\delta} + q\dot{\delta}/(\delta + h_{rug}) + K_n\delta = f$ où q est lié à la force de lubrification et dépend de la viscosité et de la taille de la particule. En supposant $\delta \ll h_{rug}$ (déformation faible de la rugosité), cette équation devient linéaire et comme la lubrification domine, la solution a un comportement suramorti. Il existe en conséquence deux échelles de temps : une échelle très petite $\tau_1 = Mh_{rug}/q$ entièrement liée à la lubrification et une plus grande $\tau_2 = \tau_{coll}^2/\tau_1$. Comme la lubrification est traitée de manière implicite dans notre approche, l'échelle τ_1 ne pose pas de problème de raideur numérique. La seconde échelle τ_2 est grande par rapport aux pas de temps usuels employés et n'impose donc pas de restriction sur le pas de temps. Ainsi, et contrairement à la DEM usuelle, il n'y a quasiment pas de contrainte sur le pas de temps du fait de la dissipation importante liée à la lubrification.

Cette conclusion n'est toutefois valable que pour les efforts normaux (ce qui est effectivement le cas si le frottement n'est pas pris en compte). Pour les efforts tangentiels, où la lubrification opère avec une singularité en $\log(h_{rug})$, la dissipation visqueuse est moins importante. Dans ce cas, le pas de temps devra être adapté. Contrairement à un régime collisionnel (où la durée de contact est très courte, de l'ordre de τ_{coll}), les suspensions denses sont plutôt dans un régime frictionnel et le temps de contact est plus grand, de l'ordre de $\dot{\gamma}^{-1}$, soit trois ordres de grandeur plus élevé que les pas de temps employés (typiquement de l'ordre de $10^{-3}\dot{\gamma}^{-1}$). Durant la quasi-totalité de ce contact, la force tangentielle varie modérément sauf en tout début du contact. Cette phase initiale doit être capturée en quelques itérations au moins ce qui nécessite un ajustement du pas de temps.

6.7 Le code MrProp

Le modèle numérique présenté dans les chapitres précédents a fait l'objet d'un développement de programme informatique – ou code de calcul – dans le cadre de ce travail. Ce réceptacle est un code baptisé MrProp (pour **M**icrostructure **r**épresentative des **P**ropergols). Il a été développé en Fortran 90 et comporte environ 18000 lignes d'instructions. Le code n'est pas encore parallélisé et toutes les simulations ont été réalisées en séquentiel.

6.7.1 Performances

Nous étudions ici les performances du modèle numérique développé en termes de convergence spatiale et temporelle. L'objectif consiste en particulier à évaluer l'ordre global du schéma, c'est-à-dire la manière dont le modèle converge vers la solution exacte à mesure que l'on diminue le pas d'espace et de temps.

Le cas traité ici est celui d'une sphère libre de rayon a dans un écoulement de cisaillement et la grandeur étudiée est le stresslet hydrodynamique de la particule (plus précisément, sa composante non-nulle $S=S_{xy}=S_{yx}$). Ce cas de calcul sera développé plus en détail ultérieurement dans le chapitre dédié aux validations. L'intérêt de considérer ici le stresslet comme variable d'étude découle de plusieurs raisons. La première tient au rôle important que revêt ce paramètre dans la rhéologie des suspensions. Ensuite, il possède une expression théorique dans cette configuration précise. Enfin, cette grandeur s'avère être la plus délicate à obtenir de manière précise, par comparaison aux vitesses notamment. Encore une fois, les détails de calcul seront consignés dans la partie validations à venir.

Pour la convergence temporelle, nous avons considéré un maillage de taille fixe $\Delta = a/5$ et fait varier le pas de temps Δt . L'erreur \mathcal{E} commise est définie par l'écart entre stresslet calculé et théorique $\mathcal{E} = |S_{calc} - S_{th}|$ (norme L_1). La Figure 6.11(a) présente l'évolution de cette erreur avec le pas de temps Δt en échelle logarithmique. L'ordre global du schéma en temps constaté est d'environ 1, c'est-à-dire que l'erreur ne diminue que proportionnellement au pas de temps, soit $\mathcal{E} \propto \Delta t$. Malgré l'intégration temporelle à l'ordre 2 (Crank-Nicolson), l'ordre global obtenu est plus faible et reflète la procédure même, en particulier le découplage du calcul de λ (Eq. (6.33)). Cela signifie que l'obtention de résultats précis est conditionnée par une valeur de pas de temps Δt assez petite. Dans la pratique toutefois, cela n'est pas particulièrement contraignant car il est de tout façon nécessaire, dans le cas de suspensions concentrées, de choisir un pas de temps limité afin d'éviter les recouvrements entre particules. Les pas de temps qui seront utilisés s'avèrent être du même ordre de grandeur que ceux reportés dans le cadre d'autres méthodes.

Nous réalisons le même type de calcul mais en faisant cette fois varier la taille de maille Δ afin de quantifier l'ordre de convergence spatiale. Les simulations sont réalisées non pas à iso- Δt mais à iso- $CFL_{diff} = 100$. Il s'agit alors plutôt d'une convergence spatio-temporelle puisque taille de maille et pas de temps varient simultanément. De manière similaire au calcul précédent, la Figure 6.11(b) présente l'erreur \mathcal{E} en fonction de Δ/a en échelle logarithmique. Cette fois, un ordre sensiblement égal à 2, soit $\mathcal{E} \propto \Delta^2$, est retrouvé. Remarquons toutefois que le stresslet est une intégrale volumique sur la particule et fait donc intervenir la fonction indicatrice dont le choix peut également jouer assez sensiblement sur l'ordre spatial.

6.7.2 Stokes ou Navier-Stokes ?

L'approche générale considère les équations de Navier-Stokes. Pour autant, la plupart des applications concernant les suspensions de type propergol se situe dans un régime très faiblement inertiel plutôt régi par les équations de Stokes. De plus, les solutions analytiques qui nous serviront ultérieurement comme solutions de référence pour les validations ne peuvent s'obtenir que dans le

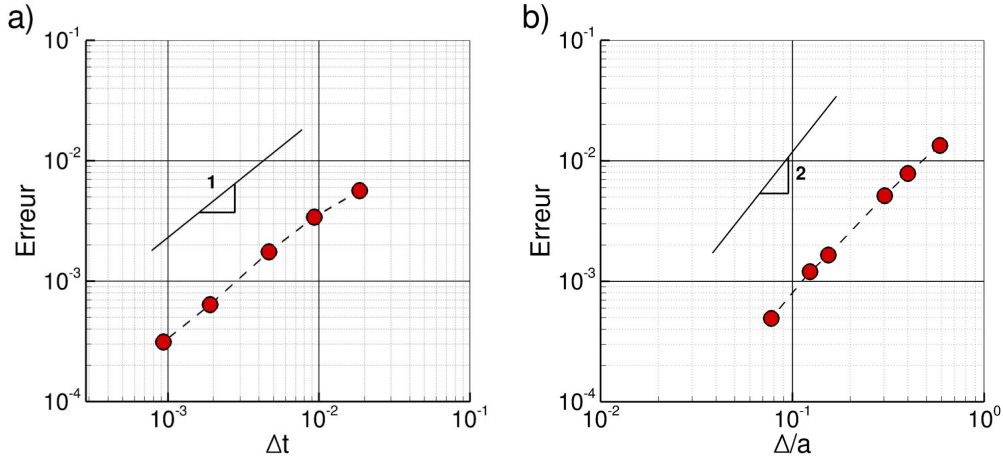


Fig. 6.11 – Convergence du calcul du stresslet : a) évolution de l'erreur en fonction de Δt ; b) évolution de l'erreur en fonction de Δ/a .

cadre des équations de Stokes qui sont linéaires. En fait, la quasi-exclusivité des calculs présentés dans ce manuscrit supposent un régime de Stokes.

La façon la plus simple de tendre vers un régime de Stokes est de considérer les équations de Navier-Stokes pour un fluide de viscosité ν très élevée. Il s'avère que cela ne représente pas toujours le meilleur choix dans le cas présent car malgré l'intégration implicite qui est – théoriquement – toujours stable, il a été souligné que dans la pratique, le pas de temps devait être tel que le CFL diffusif $\Delta t/(2\nu\Delta^2)$ reste en-deçà d'une limite, typiquement de l'ordre d'une centaine, pour ne pas trop dégrader la solution. Ainsi, choisir une viscosité arbitrairement élevée peut être contraignant en termes de pas de temps : il peut alors être plus judicieux de résoudre directement les équations de Stokes.

Les équations de Navier-Stokes et de Stokes s'écrivent ici respectivement :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho_f} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \boldsymbol{\lambda} \quad (\text{Navier-Stokes}) \quad (6.104)$$

$$0 = -\frac{\nabla p}{\rho_f} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \boldsymbol{\lambda} \quad (\text{Stokes}) \quad (6.105)$$

La différence provient des deux termes du membre de gauche. Le premier est le terme instationnaire $\partial \mathbf{u}/\partial t$ qui est souvent négligé dans le régime de Stokes³⁶. Le second est le terme convectif non-linéaire $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ qui est supposé nul dans le cas non-inertiel.

Le terme convectif peut facilement être omis et n'est tout simplement pas calculé si l'on choisit de considérer les équations de Stokes. Pour le terme instationnaire, il suffit de résoudre le problème couplé fluide/particule itérativement jusqu'à convergence. C'est seulement une fois ce régime stationnaire obtenu que les particules sont déplacées. Il suffit généralement de quelques sous-itérations pour converger le système complet, convergence qui peut être accélérée en extrapolant linéairement les valeurs de $\boldsymbol{\lambda}$ entre chaque sous-itération k , soit $\boldsymbol{\lambda}^{k+1} = 2\boldsymbol{\lambda}^k - \boldsymbol{\lambda}^{k-1}$.

36. Généralement, le vocable *équations de Stokes* sous-entend souvent *équations de Stokes stationnaires* même si les particules sont en mouvement. Le problème instationnaire est alors vu comme une succession d'états stationnaires. Il est par contre tout à fait possible, selon le problème, de conserver ce terme instationnaire dans les équations de Stokes. Ces effets instationnaires sont alors en $\mathcal{O}(Re^{1/2})$ (Kim et Karrila, 1991).

6.7.3 Résumé des étapes

La partie qui suit résume les différentes étapes principales de l'algorithme et illustre le fonctionnement du code en déroulant une itération en temps avec prise en compte des forces de lubrification et de contact.

1. Calcul de la fonction level-set

Définition pour chaque particule \mathcal{P} de sa boîte de contrôle $\mathcal{D}(\mathcal{P})$ puis calcul de la fonction level-set $\psi^n(\mathbf{x})$ (Eq. (6.40)) et de la fonction indicatrice $\mathcal{I}_{\mathcal{P}}^n(\mathbf{x})$ (Eq. (6.41)) dans $\mathcal{D}(\mathcal{P})$ connaissant les coordonnées \mathbf{X}^n des particules à l'itération n .

2. Transport du terme de forçage

Pour chaque particule \mathcal{P} , advection du terme de forçage de λ^n à λ_*^n en résolvant Eq. (6.47) dans $\mathcal{D}(\mathcal{P})$ pour un pas de temps Δt .

3. Résolution du sous-problème fluide

Calcul de la nouvelle vitesse du fluide \mathbf{u}^{n+1} et de la pression p^{n+1} (Eq. (6.25) à Eq. (6.28)) en utilisant le forçage λ_*^n .

4. Calcul des forces de contact

Utilisation de la méthode des éléments discrets (DEM) pour estimer les forces et couples de contact $\mathbf{F}^{c,n} = \mathbf{F}^c(\mathbf{X}^n, \mathbf{U}^n)$ et $\mathbf{T}^{c,n} = \mathbf{T}^c(\mathbf{X}^n, \mathbf{U}^n)$ à l'itération n .

5. Calcul des vitesses des particules

Calcul des nouvelles vitesses de translation $\tilde{\mathbf{U}}$ et rotation $\tilde{\mathbf{\Omega}}$ des particules à partir de la vitesse fluide \mathbf{u}^{n+1} en appliquant Eq. (6.38) et Eq. (6.39) avec le forçage λ_*^n et les forces de contact $\mathbf{F}^{c,n}$ et $\mathbf{T}^{c,n}$.

6. Correction de lubrification

Correction des vitesses des particules $\tilde{\mathbf{U}}$ et $\tilde{\mathbf{\Omega}}$ en prenant en compte la lubrification. La résolution du système linéaire Eq. (6.78) fournit les vitesses particules corrigées \mathbf{U}^{n+1} et $\mathbf{\Omega}^{n+1}$.

7. Imposition du mouvement rigide

Calcul de la vitesse fluide rigide $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{\Omega}^{n+1} \wedge \mathbf{r}^n$ (Eq. (6.29)) dans chaque particule \mathcal{P} .

8. Correction du terme de forçage

Mise à jour du forçage dans chaque particule en utilisant Eq. (6.34) : $\lambda^{n+1} = \lambda_*^n + (\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \mathbf{u}^{n+1})/\Delta t$.

9. Déplacement des particules

Mise à jour des nouvelles positions des particules par Eq. (6.46) : $\mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{X}^n + \frac{3}{2}\Delta t \mathbf{U}^{n+1} - \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{U}^n$.

10. Boucle en itération

Incrémentation $n=n+1$ et retour à l'étape 1 pour une nouvelle itération jusqu'au temps de calcul désiré.

Pour le cas Stokes, on reboucle les étapes 3 à 8 jusqu'à convergence. Typiquement, 2-3 itérations sont nécessaires.

VALIDATIONS ACADÉMIQUES

Sommaire

7.1	Sphère en écoulement cisailé	109
7.1.1	Champ de vitesse	110
7.1.2	Stresslet	110
7.1.3	A propos du terme de forçage	111
7.2	Sphère au voisinage d'une paroi	112
7.3	Deux sphères lisses en cisaillement	114
7.4	Trois sphères lisses en cisaillement	118
7.5	Viscosité à fréquence infinie	120
7.6	Deux sphères rugueuses en cisaillement	121
7.7	Sphère rugueuse sur plan incliné	124
7.8	Sédimentation de 10648 particules	125
7.9	Migration inertielle	126

Ce chapitre aborde un certain nombre de simulations de validation effectuées en utilisant le code développé. Nous n'en proposons uniquement qu'un « florilège » afin d'éviter un côté catalogue rébarbatif. Chacune des validations présentées permet néanmoins de vérifier un aspect physique particulier. Elles restent essentiellement académiques et s'appuient largement sur des solutions analytiques tout en focalisant sur les écoulements d'intérêt, à savoir des écoulements de Stokes dans le cas de configurations de type cisaillement. Par académique, nous entendons des validations assez amont impliquant un petit nombre de particules et pour lesquelles il existe des solutions théoriques précisément connues.

7.1 Sphère en écoulement cisailé

Le cas considéré ici est celui d'une unique particule sphérique libre et placée dans un écoulement de cisaillement simple (Figure 7.1).

Les simulations sont effectuées en résolvant les équations de Stokes. La sphère, de rayon a , est placée au centre d'un domaine cubique de taille $L=20a$ et avec une discrétisation $a/\Delta=4,9$; ce qui conduit à un maillage de taille 97^3 . Il a été vérifié que ce domaine était suffisamment grand pour ne pas induire d'effets des conditions limites. Les conditions latérales dans les directions \mathbf{e}_x et \mathbf{e}_z sont de type périodique. La condition limite dans la direction \mathbf{e}_y est de type vitesse imposée avec des vitesses $\dot{\gamma}L_y/2$ et $-\dot{\gamma}L_y/2$ aux parois supérieure et inférieure afin d'imposer un cisaillement $\dot{\gamma}$. Le pas de temps vaut ici $\Delta t=3.10^{-3} \dot{\gamma}^{-1}$, ce qui correspond à un CFL diffusif d'environ 50.

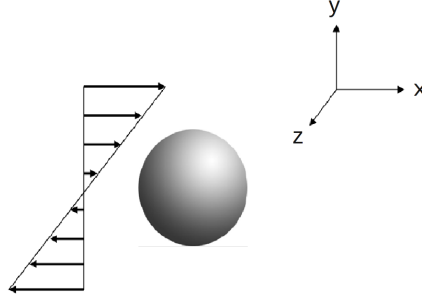


Fig. 7.1 – Sphère en écoulement cisailé.

7.1.1 Champ de vitesse

Il existe des solutions théoriques pour le champ de vitesse fluide induit par une sphère placée dans un écoulement non perturbé linéaire, soit $\mathbf{u}^\infty = \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \mathbf{x} = \mathbf{E}^\infty \cdot \mathbf{x} + \boldsymbol{\omega}^\infty \wedge \mathbf{x}$ avec \mathbf{E}^∞ le tenseur de taux de déformation et $\boldsymbol{\omega}^\infty$ le vecteur de vitesse angulaire. Dans le cas de cisaillement envisagé, la vitesse non perturbée s'écrit $\mathbf{u}^\infty = \dot{\gamma} y \mathbf{e}_x$, la rotation de l'écoulement non perturbé vaut simplement $\boldsymbol{\omega}^\infty = -\dot{\gamma}/2 \mathbf{e}_z$ et le taux de déformation

$$E_{ij}^\infty = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ \dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

La solution théorique pour la vitesse s'exprime alors par (Guazzelli *et al.*, 2011) :

$$u_i = E_{ij}^\infty x_j + \epsilon_{ijk} \omega_j^\infty x_k - a^5 E_{ik}^\infty \frac{x_k}{r^5} - \frac{5a^3}{2} \left(1 - \frac{a^2}{r^2}\right) E_{jk}^\infty \frac{x_i x_j x_k}{r^5} \quad (7.1)$$

en prenant le centre de la particule à l'origine et avec $r = \|\mathbf{x}\|$.

La Figure 7.2 montre la comparaison entre le calcul et la solution théorique Eq. (7.1) pour le champ de vitesse v calculé sur l'axe \mathbf{e}_x en fonction de la position x par rapport au centre de la particule ($x=0$). La vitesse est adimensionnée par $\dot{\gamma}a$. L'on notera la bonne corrélation avec la solution théorique à la fois pour la vitesse à l'extérieur de la particule ($|x/a| > 1$) mais aussi à l'intérieur ($|x/a| < 1$). Le profil linéaire dans cette région est imposé par le mouvement de corps rigide puisqu'il n'y a qu'une rotation $-\dot{\gamma}/2 \mathbf{e}_z$ d'où la valeur adimensionnée $v/\dot{\gamma}a=0,5$ à la surface de la particule.

Numériquement, nous trouvons une vitesse de translation de la particule de l'ordre de 10^{-4} (valeur théorique : 0) et une vitesse de rotation $\Omega_z = -0,501$ (valeur théorique : -0,5) avec les paramètres numériques choisis ($\Delta = a/4,9$ et $\Delta t = 3 \cdot 10^{-3} \dot{\gamma}^{-1}$).

7.1.2 Stresslet

L'importance de ce terme dans la rhéologie des suspensions mérite de s'y attarder un peu lors de ces validations. De plus, comme nous l'avons déjà mentionné, c'est une grandeur plus délicate à obtenir de manière précise, ce qui en fait justement une quantité discriminante pour les validations. Cette sensibilité est liée au fait que le stresslet se calcule uniquement à partir de la variable $\boldsymbol{\lambda}$ qui est – théoriquement – discontinue (car nulle dans le fluide) et qui prend généralement ses valeurs maximales à la frontière de la particule. Elle est de ce fait plus sensible aux approximations numériques. Ce stresslet s'écrit

$$\mathbf{S} = -\frac{\rho_f}{2} \int_{\mathcal{D}} (\boldsymbol{\lambda} \otimes \mathbf{x} + \mathbf{x} \otimes \boldsymbol{\lambda}) d\mathbf{x} \quad (7.2)$$

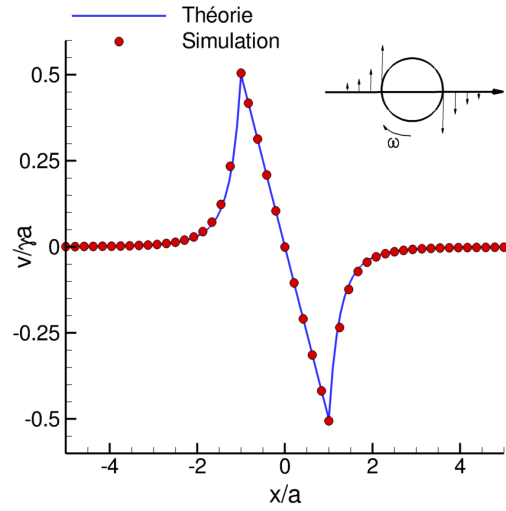


Fig. 7.2 – Perturbation de vitesse v du fluide sur l'axe \mathbf{e}_x pour une sphère cisaillée.

avec \mathbf{x} la position par rapport au centre de la particule. Dans le cas de calcul traité, le stresslet est nul sauf la composante $S_{xy} (=S_{yx})$ puisque $\mathbf{S} = 20/3\pi\eta a^3 \mathbf{E}^\infty$. En notant \mathbf{S}^* le stresslet adimensionné $\mathbf{S}^* = \mathbf{S}/(V_\mathcal{D}\eta\dot{\gamma})$, avec $V_\mathcal{D}$ le volume de la particule, la valeur théorique pour une sphère isolée devient $S_{xy}^* = 5/2$. Pour le calcul présenté avec $\Delta = a/4,9$ et $\Delta t = 3 \cdot 10^{-3} \dot{\gamma}^{-1}$, nous calculons une valeur $S_{xy}^* = 2,40$. Avec la même discrétisation spatiale et $\Delta t = 1 \cdot 10^{-3} \dot{\gamma}^{-1}$, une valeur $S_{xy}^* = 2,46$ est obtenue, en meilleur accord avec la théorie. L'emploi de pas de temps plus petits (et éventuellement de pas d'espace également plus petits) permet d'asymptoter vers la valeur théorique. Nous avons déjà eu l'occasion de voir à travers l'étude de convergence que le modèle numérique était globalement d'ordre un en temps, ce qui nécessite des pas de temps adaptés. Le stresslet est particulièrement sensible à la discrétisation temporelle alors que d'autres grandeurs comme les vitesses de translation et de rotation ne nécessitent pas d'aussi petits pas de temps et convergent rapidement vers la valeur théorique. Les pas de temps choisis ici (de l'ordre de $10^{-3} \dot{\gamma}^{-1}$) sont typiques de ceux qui seront couramment utilisés pour les simulations à venir et sont au final également du même ordre de grandeur que ceux employés dans d'autres méthodes de la littérature comme la FCM ou la dynamique stokésienne.

7.1.3 A propos du terme de forçage

Dans le modèle numérique, la condition de corps rigide est à la fois imposée à travers le terme de forçage $\boldsymbol{\lambda}$ dans l'équation de la quantité de mouvement Eq. (6.2) et aussi de manière explicite par imposition directe Eq. (6.29). Cette redondance peut paraître surprenante au premier abord. D'autant que le doute est entretenu par le fait que ce terme $\boldsymbol{\lambda}$ est absent dans certaines études utilisant les domaines fictifs (Blasco *et al.*, 2009; Carlson *et al.*, 2004; Sharma et Patankar, 2005). Pour autant, ces travaux retrouvent des résultats tout à fait satisfaisants.

La raison tient en fait au régime d'écoulement étudié. Les travaux sus-nommés s'intéressent à des écoulements inertiels $Re \sim \mathcal{O}(10^1 - 10^3)$ généralement résolus par une approche explicite. Les critères de stabilité imposent que le pas de temps Δt reste faible par rapport aux temps caractéristiques de convection et diffusion. En une itération, le champ aérodynamique a très peu évolué : la vitesse dans la particule a quasiment conservé celle, imposée auparavant, d'un corps rigide : $\tilde{\mathbf{u}} \approx \mathbf{u}$. Il découle de Eq. (6.34) que $\boldsymbol{\lambda}$ reste très faible. La prise en compte de ce terme est ainsi superflue, ce qui explique pourquoi il est possible de prédire correctement ce genre d'écoulements sans y

avoir recours. L'imposition directe, à chaque itération, via l'étape Eq. (6.29), est ainsi suffisante pour imposer la condition de mouvement rigide.

Le cas est différent pour des écoulements à très faibles nombres de Reynolds. La diffusion prédomine et d'un point de vue numérique, le critère de stabilité devient drastique, obligeant un recours à une intégration implicite des termes visqueux. Le pas de temps Δt devient ainsi grand devant le temps caractéristique de diffusion $\tau_d \sim \Delta^2/\nu$ (typiquement $\Delta t \sim 10\tau_d$ à $100\tau_d$ dans nos calculs). Dit autrement, le champ de vitesse est fortement modifié à chaque itération sous l'effet de la diffusion. Il devient donc nécessaire lors de l'étape de résolution de l'équation de quantité de mouvement Eq. (6.23) d'introduire la force λ dont le rôle est de « faire sentir » au fluide la présence de la particule.

Nous profitons de ce cas test de sphère en cisaillement pour illustrer la nécessité de prendre en compte cette force dans le calcul du champ de vitesse. La figure suivante Figure 7.3 reprend celle déjà présentée précédemment (Figure 7.2) mais en y adjoignant le résultat obtenu lorsque le terme λ n'est pas pris en compte (symboles verts). Il s'avère que la vitesse du fluide au voisinage de la particule ($|x/a| > 1$) n'est plus prédite de manière aussi précise. Le champ de vitesse dans la particule cependant ($|x/a| < 1$) reste bien modélisé (les valeurs sont quasiment superposées) car la vitesse de rotation de la particule est toujours correcte. L'absence de ce terme de forçage n'empêche donc pas un calcul de vitesse particule cohérent mais affecte par contre la vitesse du fluide environnant et, par conséquent, les interactions hydrodynamiques.

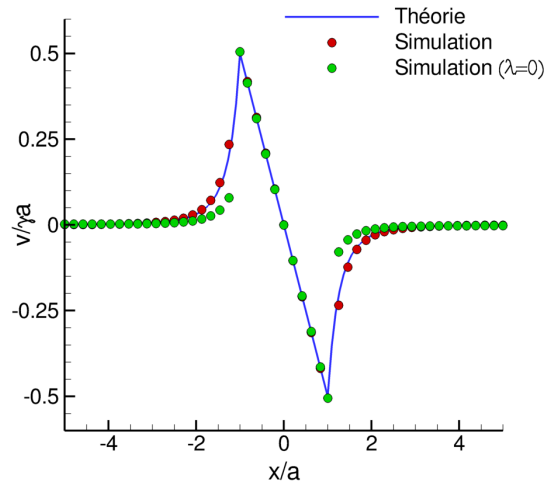


Fig. 7.3 – Perturbation de vitesse v du fluide avec et sans prise en compte du forçage λ .

7.2 Sphère au voisinage d'une paroi

Si cette particule se trouve près d'une paroi, les interactions avec celle-ci vont modifier la vitesse de la particule. En particulier, la lubrification tend à imposer la vitesse de translation de la particule égale à celle de la paroi ainsi qu'à diminuer sa vitesse de rotation. Cet effet doit être correctement pris en compte dans le cadre de suspensions concentrées en géométrie confinée où le rôle des parois est important.

Une particule sphérique de rayon a est placée librement dans un écoulement de cisaillement $\dot{\gamma} = 2U_{paroi}/L_y$ avec $L_y=10a$ la hauteur du domaine et U_{paroi} (resp., $-U_{paroi}$) la vitesse imposée sur la paroi supérieure (resp., inférieure). Les paramètres numériques choisis sont $\Delta = a/4,9$ pour la résolution spatiale et un pas de temps $\Delta t = 2.10^{-3}\dot{\gamma}^{-1}$. On suppose un écoulement de Stokes. Le

calcul est réalisé pour différentes positions y du centre de la particule et les résultats en termes de vitesse de translation U sont regroupés en Fig. 7.4. Des simulations sont effectuées sans modèle de lubrification (symboles noirs) et avec modèle de lubrification (symboles bleus). Dans ce dernier cas, la correction de lubrification est activée pour une distance entre surfaces adimensionnée $\xi_{lub}=0,2$, soit ici quand $y/L_y \geq 0,88$. La figure reporte également des simulations de Ganatos *et al.* (1982) par une méthode de collocation.

Ces résultats montrent que l'effet des parois se fait sentir assez loin et même à $y/L_y=0,8$, l'on note une déviation par rapport au profil linéaire attendu (en pointillés verts). Sur ce point, nos résultats de calcul s'accordent avec les simulations de Ganatos *et al.* (1982). Cet effet s'amplifie notablement à mesure que l'on se rapproche de la paroi : au quasi-contact ($y/L_y \approx 0,9$), la vitesse tend alors très rapidement vers la vitesse de la paroi ($U/U_{paroi} \rightarrow 1$). Là encore, nos prédictions (avec lubrification) s'accordent parfaitement avec les résultats de Ganatos *et al.* (1982). Par contre, si le modèle de lubrification n'est pas activé, ce rôle des parois est mal pris en compte et l'on retrouve une vitesse particule assez proche de ce que l'on attendrait en l'absence de paroi, soit ici $U/U_{paroi}=0,8$. Le modèle de lubrification joue donc ici parfaitement son rôle, ce qui va être confirmé par la suite dans des cas à deux particules.

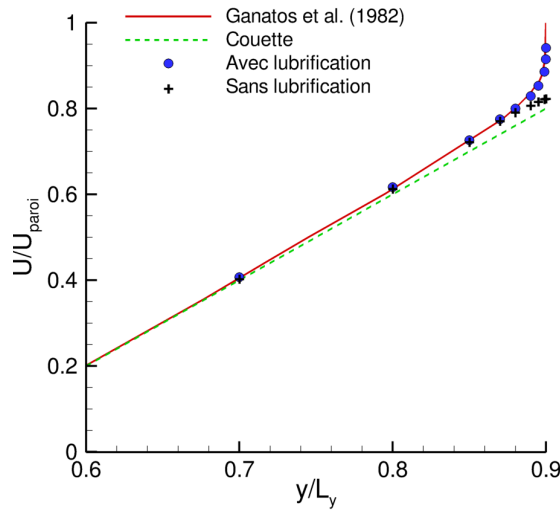


Fig. 7.4 – Vitesse de translation U/U_{paroi} d'une particule en fonction de sa position y/L_y .

La présence des parois résulte en outre en une diminution de la vitesse de rotation de la particule ainsi qu'en une augmentation sensible de son stresslet. La figure suivante Fig. 7.5 présente ainsi l'évolution du stresslet S_{xy} , adimensionné par sa valeur loin des parois $S_{xy,\infty} = 10/3\pi\eta a^3\dot{\gamma}$, en fonction de la position y/L_y de la particule. Les résultats présentés ici sont obtenus avec modélisation de la lubrification. Comme pour la vitesse, le stresslet augmente de manière abrupte lorsque l'on se rapproche de la paroi. Les prédictions sont en accord avec les travaux théoriques de Sangani *et al.* (2011) représentés par les pointillés rouges. Il s'agit du développement asymptotique suivant, valable pour $\xi < 0,15$ soit ici $y/L_y > 0,885$

$$\frac{S_{xy}}{S_{xy,\infty}} = \frac{0,847 \ln \xi^{-1} - 0,41 + 1,44 \xi \ln \xi^{-1} - 0,3 \xi}{0,2 \ln \xi^{-1} + 0,6376} \quad (7.3)$$

Cette relation suggère que le stresslet S_{xy} est fini au contact et atteint $0,847/0,2 \approx 4,2$ sa valeur en l'absence de parois.

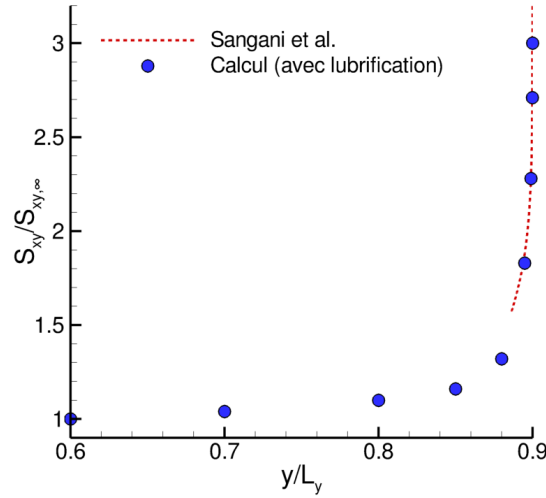


Fig. 7.5 – Stresslet $S_{xy}/S_{xy,\infty}$ d'une particule en fonction de sa position y/L_y .

7.3 Deux sphères lisses en cisaillement

Le cas considéré est celui de deux particules sphériques placées dans un écoulement de cisaillement $\dot{\gamma}$ et en écoulement de Stokes (seul cas possédant une solution analytique). Les deux sphères, de rayon a et de centre $\mathbf{x}^{(1)}$ et $\mathbf{x}^{(2)}$, sont positionnées de part et d'autre du centre du domaine et séparées d'une distance variable définie par le vecteur branche $\mathbf{r} = \mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(2)}$. Le domaine de calcul a une taille de $20a \times 20a \times 10a$ et la discrétisation à $\Delta=a/4,9$ conduit à un maillage $N = 97 \times 97 \times 49$. Les conditions limites sont les mêmes que dans le cas précédent de la sphère unique. La Figure 7.6 montre un exemple de résultat de simulation dans le cas où les particules sont relativement éloignées. Les vecteurs vitesses \mathbf{y} sont représentés ainsi que le champ de pression en couleur, ce qui permet au passage de matérialiser la perturbation hydrodynamique liée à la présence même de la particule.

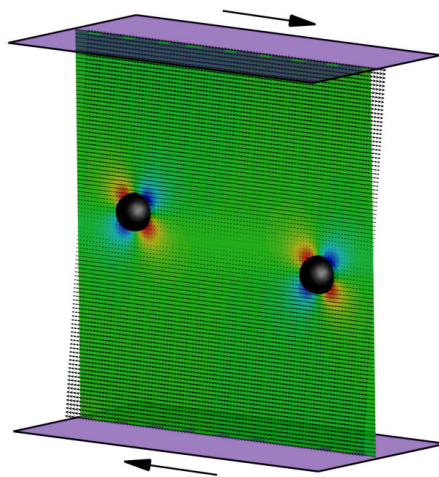


Fig. 7.6 – Interaction entre deux sphères : champ de vecteur vitesse et pression (coupe $z=L_z/2$).

Il existe des solutions analytiques sur les perturbations des vitesses des particules induites par les interactions hydrodynamiques entre ces dernières. En l'absence de ces interactions, la vitesse non

perturbée de translation et rotation pour chacune des particules est évidemment :

$$\begin{aligned}\mathbf{U}^\infty &= \dot{\gamma} y \cdot \mathbf{e}_x \\ \mathbf{\Omega}^\infty &= -\frac{\dot{\gamma}}{2} \cdot \mathbf{e}_z\end{aligned}$$

Les solutions analytiques sur la vitesse relative $\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U}^{(1)} - \mathbf{U}^{(2)}$ ont été proposées par Batchelor et Green (1972b) et s'écrivent :

$$\hat{U}_i = \epsilon_{ijk} \omega_j^\infty r_k + r_j E_{ij}^\infty - r_k E_{jk}^\infty \left\{ A(r) \frac{r_i r_j}{r^2} + B(r) \left[\delta_{ij} - \frac{r_i r_j}{r^2} \right] \right\} \quad (7.4)$$

avec $r = \|\mathbf{r}\|$. Dans Eq. (7.4), les fonctions $A(r)$ et $B(r)$ sont des fonctions de mobilité dans les directions parallèle et perpendiculaire à l'écoulement. Dans le cas présent de particules de même rayon, elles ne dépendent que de la distance r entre les particules.

La vitesse de rotation $\mathbf{\Omega}$ de chaque particule est quant à elle fournie par la relation suivante (Batchelor et Green, 1972b) :

$$\Omega_i = \omega_i^\infty + C(r) \epsilon_{ijk} E_{kl}^\infty \frac{r_j r_l}{r^2} \quad (7.5)$$

Les particules étant de même taille, elles possèdent la même vitesse de rotation. Comme les fonctions $A(r)$ et $B(r)$ précédentes, la fonction $C(r)$ ne dépend que de la distance. Ces fonctions de mobilité $A(r)$, $B(r)$ et $C(r)$ ne sont connues dans le cas général que de manière numérique. Elles ont cependant des développements asymptotiques en champ lointain et en champ proche. Des valeurs numériques pour différentes distances sont par exemple fournies dans Batchelor et Green (1972b).

Des simulations ont été effectuées dans une configuration figée pour plusieurs distances r entre particules. Les vitesses de translation et rotation des particules ainsi calculées sont exprimées en termes des fonctions de mobilité $A(r)$, $B(r)$ et $C(r)$. La Figure 7.7(a) présente les résultats obtenus dans le cas où les forces de lubrification ne sont pas modélisées. Le trait vertical en pointillés correspond à une taille de maille Δ , soit ici $\Delta \approx 0,2a$. Il apparaît clairement que les interactions hydrodynamiques à longue distance sont correctement modélisées puisque les calculs se superposent aux courbes théoriques. A mesure que la distance se réduit toutefois, la précision se dégrade et près du contact ($r/a = 2$), les prédictions de vitesses sont assez éloignées de l'attendu. Ceci est particulièrement net sur la fonction $C(r)$, signifiant que les vitesses de rotation calculées sont entachées d'une certaine imprécision.

Comme il l'a été souligné auparavant dans le modèle de lubrification, la limite à partir de laquelle les résultats se dégradent peut être estimée vers $r/a \approx 2,2$ ce qui revient à une distance surface-à-surface de $0,2a$. Cela correspond grossièrement à la taille de la maille. Ces calculs permettent ainsi de fixer la barrière de lubrification à cette taille, soit $\xi_{lub} \approx \Delta/a$. En d'autres termes, quand la distance entre surfaces devient plus petite que la taille d'une maille, il est nécessaire de recourir à une modélisation spécifique de la lubrification.

Rajoutons maintenant l'effet de la lubrification via le modèle développé en §6.5. Les mêmes calculs sont repris et présentés en Figure 7.7(b). La correction de lubrification est activée pour $r/a < 2,2$. Contrairement au cas précédent, l'on note cette fois le très bon accord entre calcul et théorie et ce, même au proche contact. Les résultats de calcul pour $r/a > 2,2$ restent identiques au cas précédent non lubrifié (Figure 7.7(a)) puisque la correction n'y est pas activée.

Si les particules se déplacent, la configuration précédente à deux particules peut alors être étudiée en termes de trajectoires relatives, c'est-à-dire l'évolution du vecteur branche \mathbf{r} en fonction du temps.

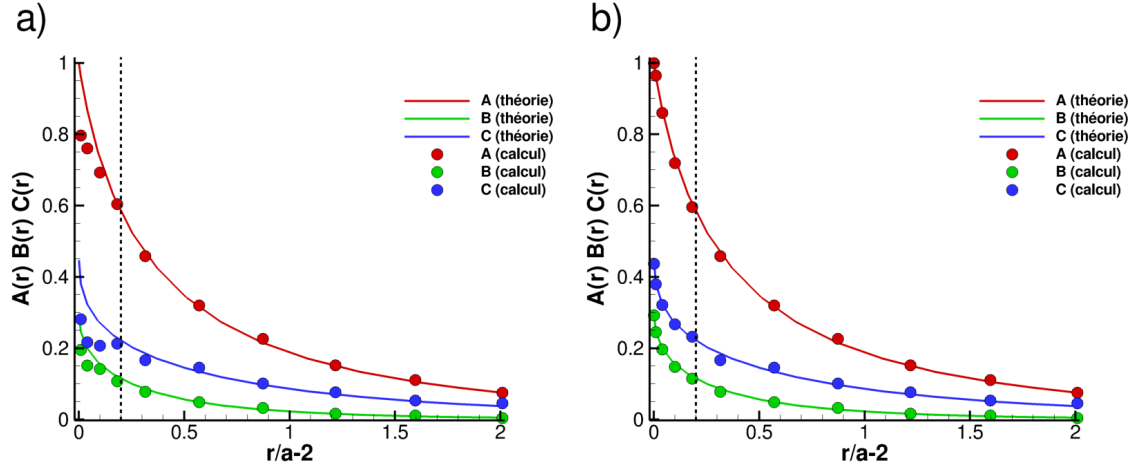


Fig. 7.7 – Fonctions de mobilité simulées en fonction de la distance $r/a-2$: a) sans correction de lubrification ; b) avec correction de lubrification.

Les simulations sont analogues aux précédentes à la différence que cette fois les particules ne sont plus figées et se déplacent librement dans l'écoulement. La Figure 7.6 précédente représente un exemple de configuration initiale de simulation. Les deux sphères sont séparées d'une distance r donnée par le vecteur \mathbf{r} . L'objectif est ici d'étudier la trajectoire relative \mathbf{r} de la paire de particules au cours du temps. Différents calculs sont effectués en faisant varier la distance verticale initiale r_y^{init} .

Les solutions théoriques de référence sont calculées en suivant la démarche de DaCunha et Hinch (1996). Leurs travaux permettent d'étudier la trajectoire de deux sphères en interaction dans un écoulement de cisaillement $\dot{\gamma}$. En posant les grandeurs adimensionnées $\mathbf{r}^* = \mathbf{r}/a$ et $t^* = \dot{\gamma}t$, les équations décrivant le mouvement relatif des deux sphères s'écrivent :

$$\begin{aligned} \frac{dr_x^*}{dt^*} &= r_y^* + Er_x^* - \frac{B}{2}r_y^* \\ \frac{dr_y^*}{dt^*} &= Er_y^* - \frac{B}{2}r_x^* \\ \frac{dr_z^*}{dt^*} &= Er_z^* \\ E &= (B-A) \frac{r_x^* r_y^*}{r^{*2}} \end{aligned} \quad (7.6)$$

avec $r^* = \|\mathbf{r}^*\|$. Les fonctions de mobilité A et B sont les mêmes que celles décrites dans le chapitre précédent. Dans leur travaux, DaCunha et Hinch (1996) emploient les expressions suivantes pour les fonctions A et B :

– **Zone d'interaction lointaine** : $r^* \geq 2,5$

$$\begin{aligned} A(r^*) &= 5r^{*-3} - 8r^{*-5} + 25r^{*-6} - 35r^{*-8} + 125r^{*-9} - 102r^{*-10} + 12,5r^{*-11} + 430r^{*-12} \\ B(r^*) &= \frac{1}{3}(16r^{*-5} + 10r^{*-8} - 36r^{*-10} - 25r^{*-11} - 36r^{*-12}) \end{aligned}$$

– **Zone intermédiaire** : $2,01 < r^* < 2,5$

$$\begin{aligned} A(r^*) &= -4,3833 + 17,7176r^{*-1} + 14,8204r^{*-2} - 92,4471r^{*-3} - 46,3151r^{*-4} - 232,2304r^{*-5} \\ B(r^*) &= -3,1918 + 12,3641r^{*-1} + 11,4615r^{*-2} - 65,2926r^{*-3} - 36,4909r^{*-4} - 154,8074r^{*-5} \end{aligned}$$

– **Zone de lubrification** : $2 < r^* \leq 2,01$

$$A(r^*) = \frac{(16,3096 - 7,1548r^*)}{r^*}$$

$$B(r^*) = \frac{2(0,4056l^2 + 1,49681l - 1,9108)}{r^*(l^2 + 6,0425l + 6,32549)} \quad \text{avec } l = \ln(r^* - 2)$$

La position relative \mathbf{r}^{init} au temps initial étant fixée, le système différentiel Eq. (7.6) est résolu avec les expressions de $A(r^*)$ et $B(r^*)$ précédentes et permet d'aboutir à la trajectoire théorique du système de particules.

La figure suivante (Figure 7.8) présente les trajectoires relatives simulées comparées à la théorie définie précédemment. Le pas de temps est ici de $\Delta t = 2 \cdot 10^{-3} \dot{\gamma}^{-1}$. Les particules sont dans le même plan de cisaillement ($r_z=0$) et initialement séparées de $r_x^{init} = -6a$ dans la direction horizontale \mathbf{e}_x et, dans la direction verticale \mathbf{e}_y , d'une distance r_y^{init} variable. Quatre cas sont ici traités $r_y^{init}=3a; 2a; a$ et $0,5a$. Les échelles de la figure sont dilatées dans la direction \mathbf{e}_y afin de bien visualiser les différentes trajectoires : la particule de référence, matérialisée en noir, apparaît donc sous la forme d'une ellipse. Il en est de même pour la courbe en pointillés censée représenter la zone d'exclusion stérique de rayon $2a$ et qui correspond à la limite de recouvrement.

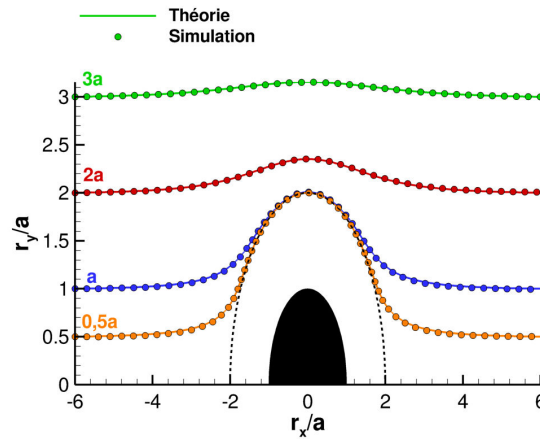


Fig. 7.8 – Trajectoires relatives pour différentes séparations verticales r_y^{init} .

La simulation permet de retrouver assez fidèlement les résultats théoriques. Un point capital est que les trajectoires simulées restent bien symétriques en vertu de la linéarité des équations de Stokes (réversibilité temporelle). Lorsque la distance verticale initiale est assez grande (par exemple $r_y^{init}=3a$), les interactions hydrodynamiques restent limitées et ne dévient que très peu les trajectoires d'un mouvement rectiligne qui serait celui attendu en l'absence de ces interactions. En deçà de la distance initiale $r_y^{init} = 2a$, les particules pourraient théoriquement entrer en contact mais sont déviées par le jeu des interactions hydrodynamiques. Pour les séparations initiales les plus faibles toutefois, les particules passent très près l'une de l'autre : leur distance est ici suffisamment réduite pour que les effets de lubrification jouent pleinement leur rôle et empêchent effectivement le contact.

La Figure 7.9 présente pour ces quatre cas de simulation l'évolution de la distance adimensionnée $\xi = r/a - 2$. L'on notera encore une fois une corrélation satisfaisante avec la théorie. Cette figure illustre d'autre part une des remarques précédentes : pour les séparations initiales les plus faibles, la distance interparticulaire peut devenir excessivement petite avec des valeurs de l'ordre de $10^{-4}a$ pour le cas $r_y^{init}=0,5a$. Sans une prise en compte correcte des effets de lubrification, les particules

se seraient ici interpénétrées. Dans le cas d'une suspension cisailée, les distances interparticulaires peuvent ainsi devenir très faibles et être de l'ordre de la taille des rugosités qui vont de ce fait induire un effet notable. Cet aspect sera abordé ultérieurement.

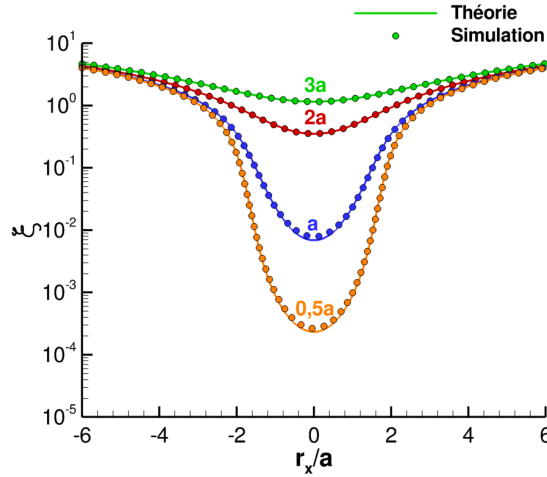


Fig. 7.9 – Distances relatives $\xi = r/a - 2$ pour différentes séparations verticales r_y^{init} .

7.4 Trois sphères lisses en cisaillement

Les cas à deux particules sont certainement les plus sympathiques : d'une part une solution de référence théorique existe et, d'autre part, comme la méthode de lubrification s'appuie sur la théorie – qui n'est valable que pour deux sphères – il est au final peu étonnant de trouver des résultats proches de l'attendu.

Passer à plus de deux particules modifie grandement les choses et ce sont réellement ces configurations qui sont discriminantes pour valider finement la lubrification. Comme il n'existe pas de solutions théoriques dans ce cas, il est nécessaire de s'appuyer sur des cas documentés dans la littérature. A notre connaissance, les seuls cas traités sont des cas de sédimentation de particules. Parmi eux, les simulations de Ganatos *et al.* (1978) emploient une technique de collocation pour calculer la sédimentation de chaînes de plusieurs sphères. Bien que cette validation ait également été réalisée avec succès, ces cas sont quelque peu éloignés de nos configurations d'intérêt comme des écoulements de cisaillement. Pour ces cas de sédimentation, les interactions de lubrification sont souvent peu intenses (mouvements tangentiels) et, en outre, ne permettent pas de valider l'impact du champ de déformation imposé.

Nous proposons ici de nous intéresser à deux configurations représentatives et présentées en Figure 7.10. Chacune de ces configurations considère un triplet de sphères de même rayon a librement suspendues dans un écoulement de cisaillement imposé $\dot{\gamma}$. Dans la première, les trois particules A , B et C sont alignées avec un angle d'orientation $\theta=30^\circ$ et dans la seconde, les particules sont agencées en "L". La distance surface-à-surface adimensionnée ξ est imposée à 10^{-2} . La sphère B est placée au centre du domaine.

En l'absence de données sur ces configurations, il est nécessaire de calculer une solution de référence par une véritable simulation directe, c'est-à-dire en remaillant suffisamment entre chaque particule pour résoudre explicitement l'écoulement interstitiel sans avoir à recourir à une quelconque correction de lubrification. Comme nous l'avons déjà spécifié, ce type d'approche est limité à quelques particules tout au plus du fait de son coût calcul prohibitif. La méthode utilisée ici

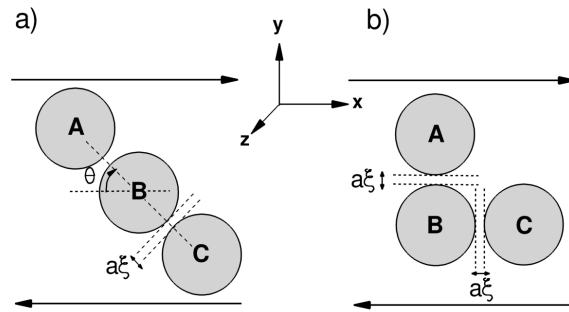


Fig. 7.10 – Schéma des configurations simulées : a) configuration alignée à $\theta=30^\circ$; b) configuration en L. La distance adimensionnée vaut $\xi=10^{-2}$.

est une technique de pénalisation (Janela *et al.*, 2005; Lefebvre, 2007a) dans laquelle le mouvement rigide est imposé en pénalisant le tenseur de taux de déformation, ce qui correspond grossièrement à considérer les particules comme un fluide de très grande viscosité. Cette méthode a été implémentée dans le solveur éléments finis du code commercial COMSOL® par Laurent Lobry au LPMC. Le maillage COMSOL® est particulièrement raffiné à la surface des particules. Une étude de convergence a permis de spécifier le maillage adapté : il est ainsi nécessaire d'avoir des mailles d'environ $0,1a$ en surface avec au moins cinq mailles de calcul dans l'interstice de $0,01a$ entre les deux particules pour résoudre correctement l'écoulement de lubrification dans cette zone. Des calculs préliminaires ont été effectués sur des cas semblables à deux sphères et comparés de manière très satisfaisante aux solutions théoriques. Ce calcul COMSOL® par pénalisation servira ici de solution de référence.

Une simulation est également effectuée avec notre code de calcul en supposant un écoulement de Stokes. Le domaine est de taille $30a$ dans toutes les directions et des conditions de périodicité sont employées dans les directions \mathbf{e}_x et \mathbf{e}_z .

Les tableaux Tab. 7.1 et Tab. 7.2 comparent les prédictions de vitesses de translation (U, V) et de rotation (Ω_z) des trois particules A, B et C obtenues respectivement sur la configuration alignée et la configuration en L. La référence est le calcul direct COMSOL® par pénalisation. Notons que comme les triplets sont dans le plan de cisaillement, les vitesses W , Ω_x et Ω_y sont nulles et ne sont donc pas consignées dans les tableaux.

	Référence	Simulation
$U^{(A)}$	0,322	0,321
$V^{(A)}$	0,463	0,467
$\Omega_z^{(A)}$	-0,388	-0,389
$U^{(B)}$	0,000	<0,001
$V^{(B)}$	0,000	<0,001
$\Omega_z^{(B)}$	-0,341	-0,339
$U^{(C)}$	-0,322	-0,323
$V^{(C)}$	-0,463	-0,463
$\Omega_z^{(C)}$	-0,388	-0,380

Tab. 7.1 – Vitesses des trois particules : cas du triplet aligné.

	Référence	Simulation
$U^{(A)}$	1,765	1,765
$V^{(A)}$	0,132	0,125
$\Omega_z^{(A)}$	-0,669	-0,669
$U^{(B)}$	0,135	0,136
$V^{(B)}$	0,132	0,125
$\Omega_z^{(B)}$	-0,500	-0,507
$U^{(C)}$	0,134	0,135
$V^{(C)}$	-0,246	-0,250
$\Omega_z^{(C)}$	-0,329	-0,324

Tab. 7.2 – Vitesses des trois particules : cas du triplet en L.

Pour le triplet aligné (Tab. 7.1), la simulation est très proche de la solution de référence, que ce soit pour la translation ou la rotation, avec une erreur moyenne de l'ordre de 1 %. A noter que sans

correction de lubrification, les vitesses calculées seraient très imprécises (erreur de l'ordre de 30 %). Les conclusions sont similaires pour le triplet en L (Tab. 7.2), avec une erreur moyenne d'environ 2 %. L'intérêt de cette configuration en L est que les interactions de lubrification sont faibles (mouvements tangentiels, en $\log \xi$) et les interactions hydrodynamiques à longue portée entre particules sont en proportion plus importantes. Ces simulations montrent que l'approche de correction de lubrification se comporte de manière satisfaisante sur ces deux types de configuration.

7.5 Viscosité à fréquence infinie

Après deux ou trois sphères lisses en cisaillement, nous pouvons nous approcher d'une suspension un peu plus réaliste en augmentant le nombre de particules. Une configuration pratique de validation est celle du calcul de la viscosité à fréquence infinie. Ce terme de fréquence infinie désigne une situation où la microstructure reste figée et n'est pas affectée par l'écoulement, c'est-à-dire une microstructure de type arrangement de sphères dures en équilibre. Il n'existe évidemment plus dans ce cas de solutions théoriques mais quelques simulations numériques sont disponibles dans la littérature et serviront à la comparaison.

La simulation considère N_p particules sphériques et lisses de rayon a dans un domaine cubique de volume V . La fraction volumique vaut alors $\phi = 4\pi a^3 N_p / 3V$. Les particules sont initialement placées aléatoirement en utilisant un algorithme de Monte-Carlo écrit pour l'occasion et inspiré de Torquato (2002). La taille du domaine est de $30a$ dans les trois directions et la discrétisation spatiale vaut $\Delta = a/4,9$ ce qui donne un nombre total de points de calcul de 147^3 . Un écoulement de cisaillement $\dot{\gamma}$ est généré en imposant des vitesses opposées aux parois inférieure et supérieure. Les conditions limites dans les directions de l'écoulement et de la vorticit  sont p riodiques et l'on considère un  coulement de Stokes. Le nombre de particules d pend de la fraction volumique et pour $\phi=0,6$, la configuration contient $N_p \approx 3900$ particules.

La viscosit  relative η_r^∞ de cette suspension est calcul e par sommation des stresslets S_{xy} de chaque particule, soit

$$\eta_r^\infty = 1 + \frac{1}{\dot{\gamma}\eta V} \sum_{i=1}^{N_p} S_{xy}^{(i)} \quad (7.7)$$

Pour chaque fraction volumique ϕ consid r e (entre 0,05 et 0,6), une configuration al atoire est construite puis la viscosit  est calcul e par simulation. Cette  tape est r p t e dix fois afin d'obtenir une valeur moyenne de viscosit .

Les r sultats obtenus sont pr sent s en Fig. 7.11 avec des simulations similaires de Sierou et Brady (2001) (par SD) et Yeo et Maxey (2010b) (par FCM). Nos pr dictions s'av rent tr s proches des simulations de la litt rature. Quelques l g res diff rences sont not es avec Sierou et Brady (2001) pour les fractions volumiques  lev es. Cet  cart est attendu puisque nos simulations prennent en compte deux parois solides (la suspension est confin e dans une direction) alors que celles de Sierou et Brady (2001) sont r alis es en domaine totalement p riodique.

Une divergence de viscosit  appara t pour $\phi \rightarrow \phi_m$. En fittant nos r sultats avec une loi de Krieger-Dougherty (Eq. (3.28)), nous obtenons $[\eta]=2,32$ et $\phi_m=0,68$. Dans ce r gime dense, la distance minimale entre particules peut  tre tr s petite (jusqu'  $10^{-6}a$). Malgr  cela, la r solution du probl me de lubrification se passe sans encombre et requiert tout au plus 20   25 it rations.

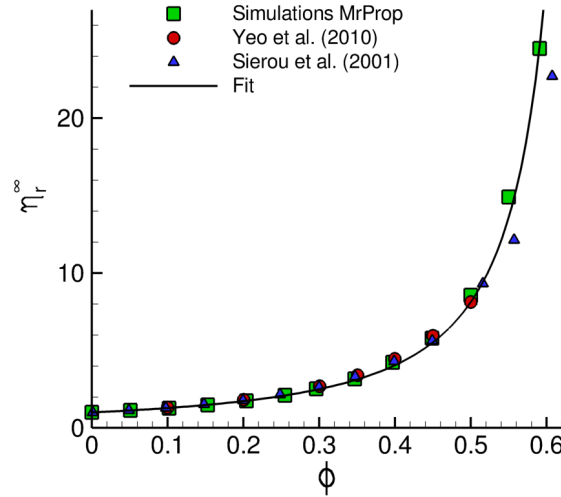


Fig. 7.11 – Viscosité à fréquence infinie η_r^∞ pour des arrangements aléatoires à différentes fractions volumiques ϕ . Le fit est obtenu pour une loi de Krieger-Dougherty avec $[\eta]=2,32$ et $\phi_m=0,68$.

7.6 Deux sphères rugueuses en cisaillement

Cette partie cherche à valider certains aspects liés à la force de contact en présence de rugosités et de frottement. Cela permet du même coup d'obtenir de premiers éléments qualitatifs sur ces effets, cette configuration à deux particules pouvant être considérée comme un cas de suspension très diluée. Comme il l'a été souligné auparavant, les distances entre particules dans une suspension cisailée peuvent être très petites, de l'ordre de la taille des rugosités qui vont de ce fait jouer un rôle sensible. La configuration traitée ici est identique au cas précédemment étudié de deux sphères lisses (voir §7.3) mais les surfaces sont maintenant rugueuses avec une rugosité adimensionnée $\xi_{rug} = h_{rug}/a$. Dans le cas où la rugosité est plus grande que la distance minimale d'approche, un contact aura lieu.

La simulation suivante reprend le cas à deux sphères avec $\mathbf{r}^{init}=(-6a, 0,5a, 0)$ et avec les rugosités adimensionnées $\xi_{rug}=10^{-3}$ et $\xi_{rug}=10^{-2}$. La raideur mécanique de la rugosité est telle que sa déformation \bar{e} est de 10 %. La dissipation mécanique est ignorée ($e_n=e_t=1$).

Il n'existe pas de solution théorique dans ce cas et la solution de référence utilisée ici se base sur la résolution du système différentiel Eq. (7.6) dans lequel une modélisation spécifique du contact – identique au modèle DEM utilisé – a été implanté. Ce modèle de référence a été développé par François Peters au LPMC sous Matlab®.

La figure suivante Figure 7.12 présente les trajectoires relatives pour la paire de particules pour les rugosités $\xi_{rug}=0$; 10^{-3} et 10^{-2} . On note très nettement la rupture de symétrie amont-aval et l'apparition d'un déplacement résiduel dans la direction verticale qui augmente avec la rugosité. Le contact n'opère qu'à travers des forces agissant uniquement en compression : le contact induit une rupture de symétrie amont-aval car cette force de contact en compression n'est pas compensée par une force de traction équivalente une fois la particule passée dans le quadrant extensionnel. Cette rupture de symétrie entraîne une anisotropie de la microstructure. On notera le bon accord entre simulation et solution de référence.

Pour les deux rugosités non nulles, des calculs sont réalisés avec et sans frottement. Le frottement n'a quasiment aucun rôle : les trajectoires des particules non frottantes sont confondues avec celles des particules frottantes. Cet effet est retrouvé à la fois par les simulations et les calculs théoriques.

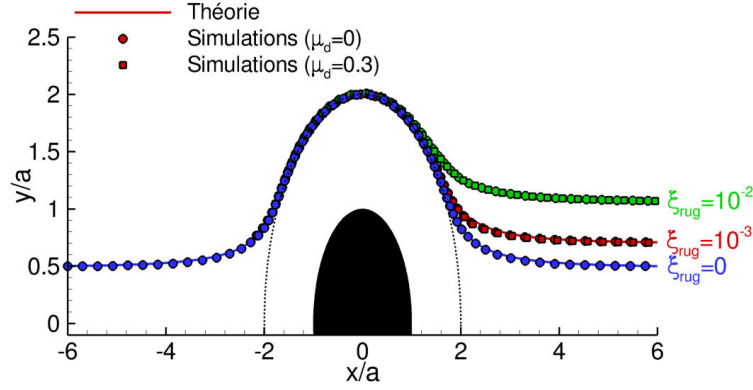


Fig. 7.12 – Trajectoires relatives pour une paire de particules ayant différentes rugosités ($\xi_{rug}=0$; 10^{-3} et 10^{-2}) et coefficients de frottement ($\mu_d=0$ et $0,3$) : théorie (trait plein) et simulations (symboles).

La présence de rugosités induit également des effets notables sur les grandeurs rhéologiques comme les différences de contraintes normales notamment. La Fig. 7.13 montre l'évolution des différences de contraintes normales adimensionnées N_1^* et N_2^* en fonction de l'angle θ d'orientation de la paire de particules. Ces quantités sont ici définies par

$$N_1^* = 2 \frac{(S_{xx}^h + S_{xx}^c) - (S_{yy}^h + S_{yy}^c)}{S_\infty} \quad (7.8)$$

$$N_2^* = 2 \frac{(S_{yy}^h + S_{yy}^c) - (S_{zz}^h + S_{zz}^c)}{S_\infty} \quad (7.9)$$

avec \mathbf{S}^h le stresslet hydrodynamique et \mathbf{S}^c le stresslet de contact. Elles sont adimensionnées par le stresslet $S_\infty = 20/3\pi\eta a^3\dot{\gamma}$ d'une paire de particules sans interactions hydrodynamiques. Le contact est ici non-frottant ($\mu_d=0$).

Encore une fois, l'accord entre simulation et solution de référence est plutôt bon, même si quelques petites différences sont visibles en particulier lors du passage entre régime lubrifié et non-lubrifié. L'effet principal de la rugosité se situe dans le quadrant extensionnel ($\pi - \theta > \pi/2$) du fait de la perte de symétrie : les particules sont plus éloignées et les contraintes hydrodynamiques s'en trouvent réduites. Dans le quadrant de compression ($\pi - \theta < \pi/2$), la force de contact induit une augmentation des contraintes normales via le dipôle de contact $\mathbf{F}^c \otimes \mathbf{r}$. A mesure que ce dipôle de contact croît, le dipôle hydrodynamique décroît, ce qui conduit à des effets à peine visibles sur la contrainte totale pour les rugosités employées ici. Dans Zarraga et Leighton Jr (2001), des résultats similaires sont obtenus mais avec un effet du contact exacerbé du fait des rugosités extrêmes considérées, jusqu'à $\xi_{rug} = 0,5$. Des rugosités de surface ξ_{rug} réalistes sont typiquement dans la gamme $10^{-3} \sim 10^{-2}$ (Smart et Leighton, 1989). Puisque les valeurs positives de $N_1^*(\theta)$ et $N_2^*(\theta)$ diminuent dans le quadrant extensionnel, la rugosité contribue à une valeur globalement négative de N_1^* et N_2^* . En conséquence, $|N_1^*|$ et $|N_2^*|$ augmentent avec la rugosité, en accord avec les résultats de la littérature (Davis *et al.*, 2003; Wilson et Davis, 2002; Zarraga et Leighton Jr, 2001).

Le rôle du frottement est illustré dans le cas de la plus grande rugosité $\xi_{rug}=10^{-2}$ et les résultats obtenus sont présentés en Fig. 7.14 pour le cas sans frottement ($\mu_d=0$) et avec frottement $\mu_d=0,3$. Contrairement à la rugosité, le frottement n'agit sur les contraintes uniquement que dans le quadrant de compression, ce qui est cohérent avec une absence d'effet sur les trajectoires. Il n'opère que ponctuellement, lors du contact, à travers la contribution additionnelle de la force tangentielle $\mathbf{F}_t^c \otimes \mathbf{r}$.

Le type de résultat présenté en Fig. 7.14 peut être utilisé pour estimer le rôle du frottement sur la rhéologie des suspensions diluées en intégrant sur toutes les trajectoires possibles. Cet exercice a

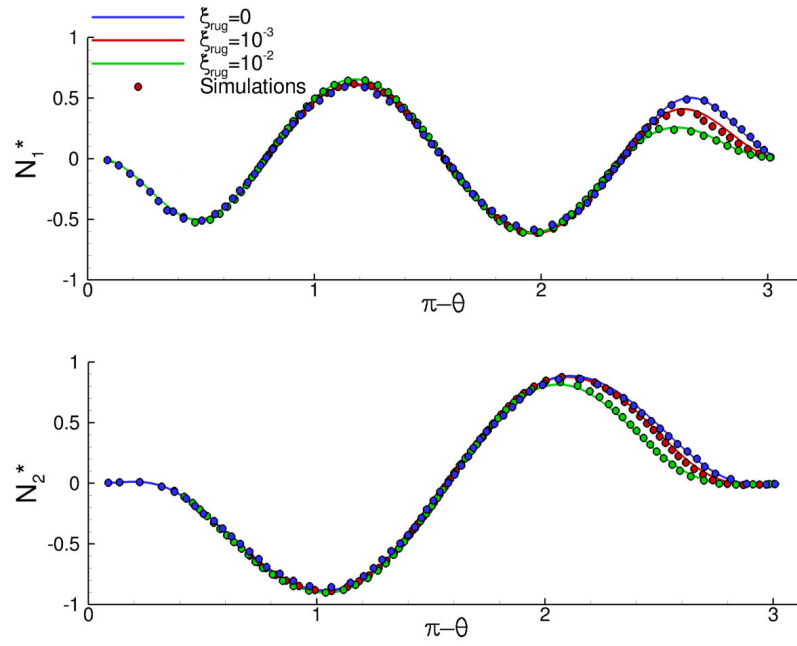


Fig. 7.13 – Evolution de N_1^* et N_2^* pour des sphères rugueuses en fonction de l'angle d'orientation du doublet pour trois rugosités : simulations (symboles) et théorie (traits pleins).

notamment été réalisé par Wilson et Davis (2000) qui montrent que le frottement induit une légère augmentation de $|N_1|$ et $|N_2|$ (avec N_1 et N_2 négatifs) et $|N_1| > |N_2|$. Nous verrons plus tard que les conclusions s'inversent en régime concentré, comme le suggèrent également les simulations de Wilson et Davis (2002), puisque l'on trouve plutôt une diminution de $|N_1|$ et une augmentation de $|N_2|$ ainsi que $|N_1| < |N_2|$.

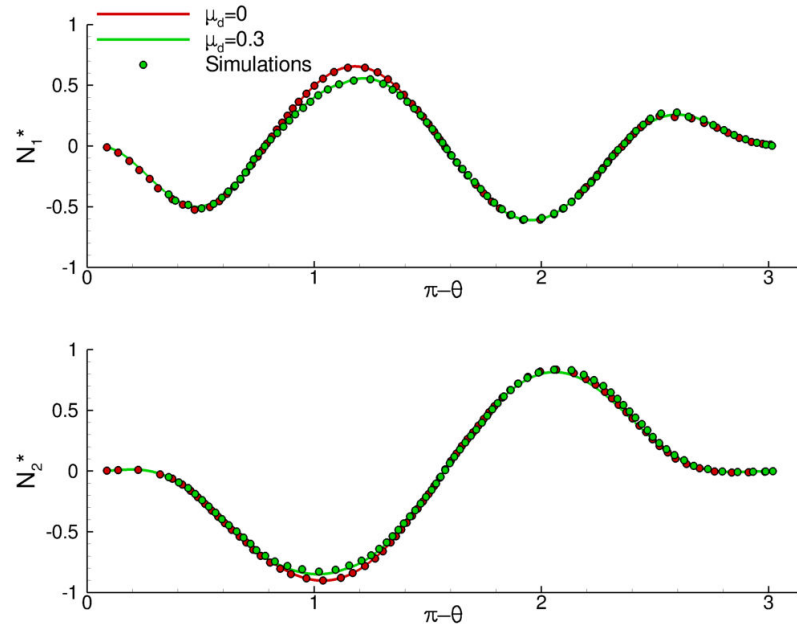


Fig. 7.14 – Evolution de N_1^* et N_2^* pour des sphères rugueuses ($\xi_{rug}=10^{-2}$) en fonction de l'angle d'orientation du doublet pour deux coefficients de frottement : simulation (symboles) et théorie (traits pleins).

7.7 Sphère rugueuse sur plan incliné

Le mouvement d'une sphère rugueuse sur un plan incliné offre une configuration pratique permettant de valider le couplage entre force de contact et lubrification aux parois. Une sphère de rayon a , possédant des rugosités de taille h_{rug} , est placée sur une paroi dans un champ de gravité $\mathbf{g} = (g \sin \theta, -g \cos \theta, 0)$, ce qui permet de simuler de manière simple un plan incliné d'angle θ (voir Figure 7.15).

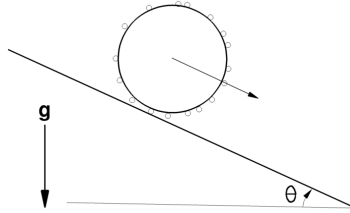


Fig. 7.15 – Schéma d'une sphère rugueuse sur plan incliné.

La Figure 7.16 présente les vitesses de translation et de rotation calculées par le code pour différentes inclinaisons θ accompagnées de résultats expérimentaux sur cette même configuration (Davis *et al.*, 2003). Les vitesses de translation et rotation sont adimensionnées respectivement par $U_s \sin \theta$ et $U_s \sin \theta / a$ avec $U_s = 2a^2 \Delta \rho g / 9\eta$ la vitesse de Stokes. La rugosité $h_{rug} = 0,0015a$ et le coefficient de frottement $\mu_d = 0,12$ sont choisis conformément aux valeurs de Davis *et al.* (2003).

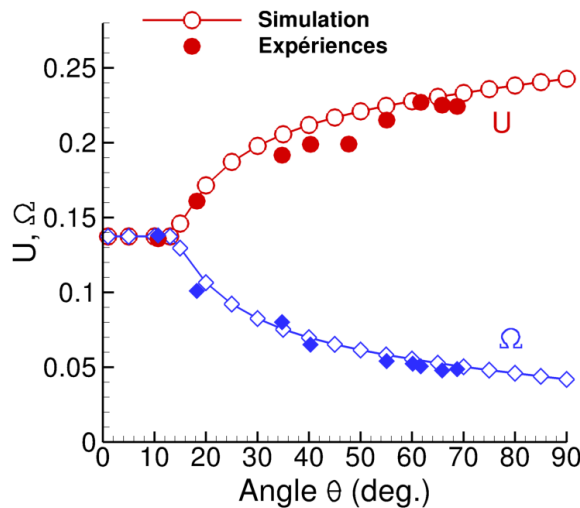


Fig. 7.16 – Vitesses adimensionnées de translation U (en rouge) et de rotation Ω (en bleu) d'une sphère sur plan incliné d'angle θ : calculs (symboles vides) et expériences (symboles pleins) (Davis *et al.*, 2003).

Simulations et expériences sont en bon accord ce qui montre la pertinence de la modélisation physique employée par rapport aux phénomènes physiques attendus. Pour les faibles angles, la sphère roule sans glissement et on a donc $U = a\Omega$. A mesure que l'inclinaison augmente, un angle critique (ici de l'ordre de $\theta_{cr} \approx 15^\circ$) est atteint et la sphère entame un glissement avec roulement partiel, soit $U > a\Omega$. Le cas limite $\theta=90^\circ$ correspond à une sphère chutant parallèlement à une

distance h_{rug} d'une paroi. Le mouvement est alors dicté uniquement par la lubrification et la gravité et les valeurs limites calculées $U=0,231$ et $\Omega=0,036$ correspondent à ce qui peut être obtenu via les fonctions de résistance théoriques pour une interaction paroi/particule. Cette validation montre qu'un modèle de contact physique est nécessaire – en sus de la lubrification – pour décrire fidèlement le mouvement lors d'un contact, en particulier la transition roulement/glissement ("*roll-slip*"). La prise en compte de la rugosité est également importante puisque cette dernière contrôle la distance particule-paroi et donc l'intensité des forces de lubrification. Du point de vue théorique, une sphère parfaitement lisse au contact de la paroi resterait « scotchée » sans sédimenter du fait de la singularité des interactions de lubrification au contact.

7.8 Sédimentation de 10648 particules

Ce cas de validation n'en est pas un à proprement parler et il s'agit plutôt ici d'un calcul qualitatif permettant d'évaluer les performances du code dans une configuration à grand nombre de particules. Ces 10648 ($=22^3$) particules sont initialement placées de manière ordonnée (cubique simple) dans la partie supérieure d'un domaine de calcul rectangulaire de taille $L \times 2L \times L$ avec $L=47a$. Les particules sont plus lourdes que le fluide environnant ($\rho_p/\rho_f=1,5$) et vont sédimenter. Tous les modèles physiques sont activés, en particulier lubrification, contact avec frottement, ainsi que rugosité ($\xi_{rug}=10^{-3}$). La résolution spatiale vaut ici $\Delta = a/4,1$, soit un maillage de $193 \times 385 \times 193$ comportant au total environ 14 millions de points de calcul. La simulation nécessite environ 25 Go de RAM.

La Fig. 7.17 présente quelques instantanés de configuration des particules pour différents temps adimensionnés t/t_s où le temps caractéristique t_s est défini par $t_s = L/U_s$ avec $U_s = 2a^2\Delta\rho g/9\eta$ la vitesse de Stokes. Une « langue » de particules, issue du cœur de la suspension, s'effondre très rapidement puis est suivie ensuite par le reste de la suspension. Les particules situées près des parois chutent plus lentement du fait des interactions de lubrification avec ces parois. Nous avons déjà quantifié cet effet dans une précédente validation (particule rugueuse sur plan incliné) où la particule ne sédimentait qu'avec seulement 0,23 fois sa vitesse de Stokes pour une distance particule/paroi de $1,5 \cdot 10^{-3}a$. Le phénomène est exacerbé pour les particules situées dans les coins où les effets des deux parois se font sentir et la vitesse de chute encore plus faible (voir Fig. 7.17(f)). Le calcul a été stoppé à $t/t_s=1,61$, alors que les dernières particules sédimentent encore (mais très lentement), après environ 72 h de calcul.

Pour cette simulation, le tableau 7.3 présente les performances obtenues par profiling. La majeure partie du temps de calcul se situe dans la résolution du sous-problème fluide avec notamment l'inversion des systèmes linéaires issus des équations de quantité de mouvement ou du problème de Poisson. Ces deux postes représentent ici environ 42 % du temps total et sont indépendants du nombre N_p de particules. Le sous-problème particule (transport du terme de forçage, calcul des fonctions level-set et du mouvement rigide) accapare environ 36 % du temps total mais il n'augmente que linéairement avec N_p . Seule la résolution du problème de lubrification n'est pas linéaire en N_p puisqu'elle s'appuie sur un gradient conjugué. Elle ne représente qu'environ 10 % du coût calcul total ici bien que dépendant fortement de la configuration des particules, en particulier la taille des amas lubrifiés. Au final, le temps calcul n'est que modérément dépendant du nombre N_p de particules, au contraire d'une méthode comme la dynamique stokésienne qui, dans sa version originale, avait une complexité en $\mathcal{O}(N_p^3)$, rédhibitoire pour des simulations à très grand nombre de particules. La partie collision est très peu gourmande en temps calcul, même pour 10^4 particules, dès lors que les distances entre particules sont calculées. Enfin, la rubrique "Autres" regroupe les sauvegardes, le calcul du pas de temps, le calcul des grandeurs rhéologiques,...

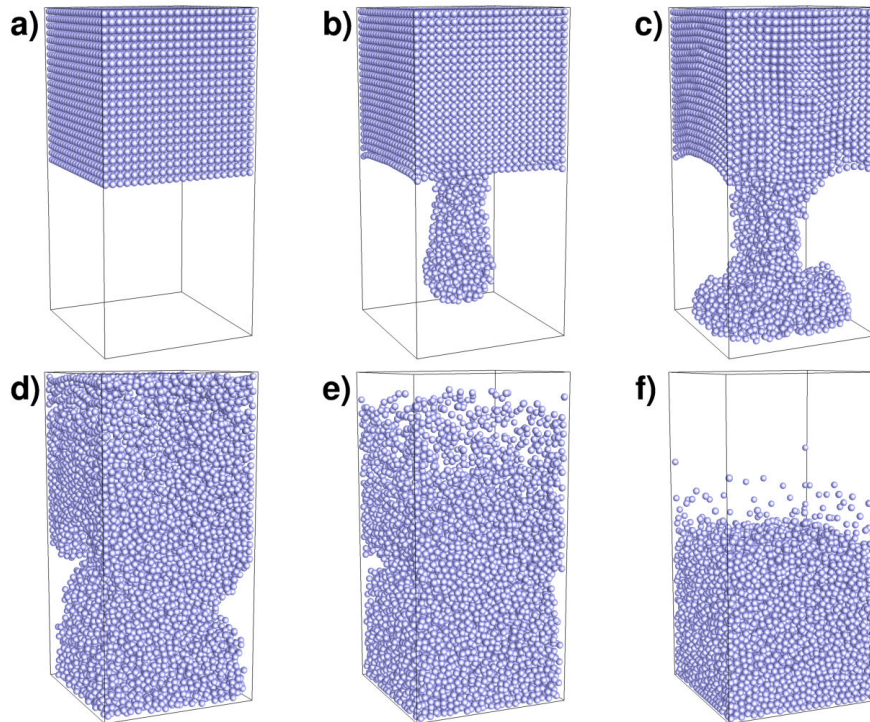


Fig. 7.17 – Configuration des particules à différents instants : a) $t/t_s=0,00$; b) $t/t_s=0,06$; c) $t/t_s=0,14$; d) $t/t_s=0,32$; e) $t/t_s=0,61$; f) $t/t_s=1,61$.

	% temps CPU
Résolution quantité de mouvement	28,6
Advection forçage	20,4
Résolution problème de Poisson	13,7
Lubrification	9,8
Calcul vitesse particule	6,9
Calcul level-set	5,7
Distances particules	3,3
Imposition mouvement rigide	2,6
Forces de collision	0,1
Autres	8,9

Tab. 7.3 – Temps CPU par sous-programmes pour la sédimentation de 10648 particules.

7.9 Migration inertielle

Terminons par une rapide incursion dans le monde inertiel afin de démontrer que l'approche numérique développée est également apte à traiter des écoulements hors du régime de Stokes. Le cas envisagé est celui d'une particule unique dans un écoulement de Poiseuille tel que présenté en Figure 7.18.

La particule, de rayon a et de même densité que le fluide, est placée dans un écoulement de Poiseuille cylindrique de rayon R . Cette particule va migrer vers une position d'équilibre r_{eq} située vers $r_{eq} \approx 0,6R$, c'est-à-dire dans une région de l'écoulement globalement à mi-chemin entre l'axe de symétrie et la paroi. Le processus physique à l'origine de cette migration est différent de celui mis en œuvre en régime de Stokes qui est, dans ce dernier cas, lié aux interactions entre particules. En régime de Stokes, il est en effet possible de démontrer qu'une unique particule sphérique dans un

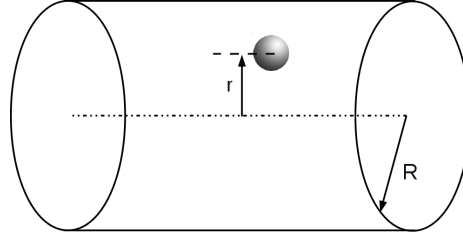


Fig. 7.18 – Schéma de la migration en écoulement de Poiseuille.

écoulement newtonien unidirectionnel ne peut pas migrer latéralement (Bretherton, 1962).

La raison physique de cette migration a du coup longtemps fait débat et il faudra pourtant attendre les années 1960 pour qu'un travail expérimental (Segré et Silberberg, 1962) décrive de manière détaillée ce phénomène depuis lors dénommé *effet Segré-Silberberg*. L'explication arrivera un peu plus tard après de nombreux travaux théoriques (voir Matas *et al.* (2004a,b) pour un aperçu de ces développements). Il s'agit en fait d'une force de portance (force de Saffmann) s'exerçant sur la particule lorsque cette dernière est placée dans un écoulement où le cisaillement n'est pas constant, comme dans un écoulement de Poiseuille par exemple. Cette force tend à déplacer la particule vers les parois et, dans le même temps, la paroi exerce une force répulsive sur la particule : c'est la compétition entre ces deux forces qui impose une position d'équilibre intermédiaire entre paroi et axe de symétrie. Des études approfondies récentes, à la fois expérimentales (Matas *et al.*, 2004a) et numériques³⁷ (Yang *et al.*, 2005), ont permis de préciser cette position d'équilibre qui se situe autour de $r_{eq} \approx 0,6R$ et dépend du rapport de taille a/R et du nombre de Reynolds de l'écoulement $Re_c = U_c R / \nu$ avec U_c la vitesse sur l'axe.

La force de Saffmann est nulle pour un écoulement de Stokes et n'existe que lorsque l'écoulement est inertiel. Cependant – et c'est en fait ce qui a retardé la compréhension du phénomène – il suffit d'un nombre de Reynolds très faible pour que cette migration se manifeste. Dans les expériences de Karnis *et al.* (1966), cet effet est mesuré alors que $Re_c \approx 0,1$. Dans tous les cas, le Reynolds particulaire $\dot{\gamma} a^2 / \nu$ reste très petit. Il serait ainsi théoriquement possible d'entrevoir cet effet Segré-Silberberg dans les écoulements de propérgol. Dans la réalité toutefois, le fait que l'écoulement soit concentré favorise un mécanisme usuel de migration à travers les interactions entre particules.

Terminons là cette digression et revenons au calcul. Dans cette simulation, les paramètres sont choisis pour s'approcher d'un calcul existant (Pan et Glowinski, 2005), soit $a/R=0,15$ et $Re_c = 50$. L'écoulement de Poiseuille est numériquement généré en rajoutant dans l'équation de quantité de mouvement du fluide un gradient de pression longitudinal $\nabla p \cdot \mathbf{e}_x$ (la relation de Poiseuille fournit $\nabla p \cdot \mathbf{e}_x = -4\nu U_c / R^2$). Le domaine physique est un tube cylindrique de rayon R et de longueur R et qui est discrétisé en 129 éléments dans chaque direction. Une condition de périodicité est imposée dans la direction de l'écoulement afin de simuler un cylindre de longueur infinie. Pour imposer fictivement une géométrie cylindrique (alors que le domaine est cubique), il suffit de forcer, à chaque itération, une vitesse fluide nulle hors du cylindre fictif de rayon R inscrit dans le domaine. Bien qu'approximative, cette méthode permet de retrouver parfaitement le profil parabolique théorique de la vitesse.

La Figure 7.19 présente la comparaison, pour notre calcul et celui de Pan et Glowinski (2005), de l'évolution de la position radiale r/R de la particule au cours du temps. Nous avons réalisé deux simulations correspondant à deux positions initiales : la première est près de l'axe ($r/R=0,2$) tandis que la seconde se situe proche de la paroi ($r/R=0,75$).

Dans tous les cas, nous observons clairement la propension de la particule à migrer vers une

37. Il s'agit en l'occurrence de simulations par domaine fictif comme notre approche.

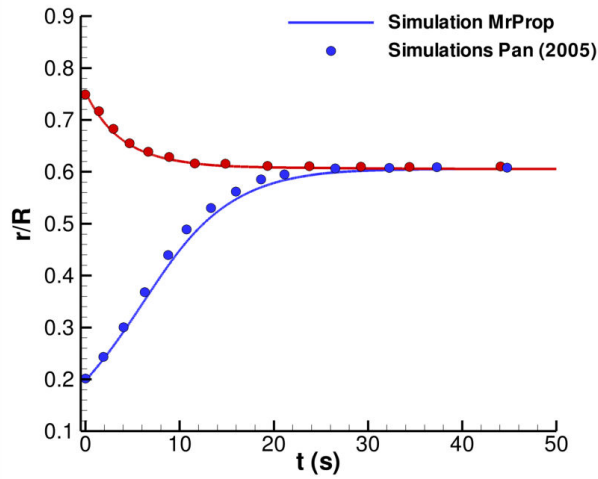


Fig. 7.19 – Evolution temporelle de la position radiale de la particule pour deux positions initiales.

position d'équilibre identique $r_{eq} \approx 0,6R$, qui est la valeur attendue dans ce cas précis (et même $r_{eq}/R = 0,601$ d'après Yang *et al.* (2005) qui ont aussi simulé cette configuration). La durée nécessaire à atteindre cet équilibre est assez long, environ 30 s. en temps physique, ce qui correspond à un temps adimensionné d'environ $500\dot{\gamma}_w^{-1}$ avec $\dot{\gamma}_w = 2U_c/R$ le cisaillement en paroi. Les deux simulations donnent des résultats particulièrement similaires validant au passage la bonne prise en compte des effets inertiels dans le code.

TROISIÈME PARTIE

Simulations numériques des suspensions

GÉNÉRALITÉS SUR LES SIMULATIONS

Sommaire

8.1	Objectif général	131
8.1.1	Cadre de l'étude numérique	131
8.1.2	Déroulement et exploitation des calculs	132
8.1.3	Zones de cœur et zones de paroi	133
8.2	Etudes paramétriques préliminaires	135
8.2.1	Taille du domaine et nombre de particules	135
8.2.2	Dissipation mécanique	136
8.2.3	Raideur mécanique	137
8.2.4	Taille des rugosités	139
8.2.5	Modèle minimal de lubrification	141

8.1 Objectif général

Le but des calculs réalisés dans ce travail est de contribuer à une meilleure connaissance de la rhéophysique et de la microstructure des suspensions non-browniennes et non-colloïdales. Malgré les nombreuses études existantes, la complexité de la physique des suspensions fait qu'il reste encore un certain nombre de phénomènes mal appréhendés ou de résultats expérimentaux peu compris. En guise d'exemple, nous avons déjà souligné que la valeur de la première différence de contraintes normales N_1 fait encore débat à la fois par la disparité des résultats expérimentaux disponibles mais aussi par le manque de corrélation inexpliqué entre calculs et mesures.

L'objectif de ce chapitre est de fournir des précisions d'ordre général concernant les simulations à venir. Des études paramétriques permettront également de fixer des valeurs pour quelques paramètres physiques et numériques.

Il existe dans la communauté scientifique quelques codes de calcul globalement équivalents à celui qui a été développé dans ce travail. A notre connaissance cependant, il se démarque grâce à deux spécificités. D'une part, il intègre une modélisation plus fine du contact, ce qui permet en particulier une prise en compte des forces de frottement. D'autre part, les interactions particule-paroi sur la rhéologie ont été modélisées de manière plus rigoureuse. Ce rôle du frottement fera l'objet du chapitre 9 tandis que l'effet des parois sera abordé dans le chapitre 10.

8.1.1 Cadre de l'étude numérique

Débutons par rappeler que l'on s'intéressera ici exclusivement à une suspension modèle composée de particules sphériques, iso-denses, non-inertiels et de même rayon a .

La sollicitation imposée sera de type cisaillement simple. Celle-ci est obtenue via le mouvement des parois inférieure et supérieure avec des vitesses opposées : dans tous les cas, il y aura donc présence de parois et donc d'un confinement de la suspension. Pourquoi ce choix des parois ? En premier lieu, il s'avère évidemment plus proche de la réalité physique, en particulier des expériences académiques de rhéométrie. Ensuite, la majeure partie des travaux numériques de la littérature s'est concentrée sur des suspensions non-confinées. Le domaine est alors supposé périodique dans toutes les directions. Pourtant, certaines simulations ont montré que les parois jouaient un rôle important – par ailleurs différent en 2D et en 3D – et induisaient une structuration de l'écoulement (Kromkamp *et al.*, 2006; Nott et Brady, 1994; Singh et Nott, 2000). Des études plus récentes par FCM ont clairement mis en évidence la présence d'une organisation en couches près des parois (Yeo et Maxey, 2010a,b,d), organisation également visible expérimentalement (Blanc, 2011; Metzger *et al.*, 2013). Les particules restent piégées en très proche paroi sous l'effet de la lubrification et la structuration joue de manière notable sur les coefficients de diffusion ou les propriétés rhéologiques avec en particulier une diminution de la viscosité et de $|N_1|$. Ce rôle majeur des parois, associé à un nombre d'études réduit, mérite donc que l'on s'y intéresse.

8.1.2 Déroulement et exploitation des calculs

Le système de coordonnées utilisé est classique avec les notations suivantes : x dans la direction de l'écoulement, y dans celle du gradient de vitesse et z dans celle de la vorticit . Le domaine de calcul est de taille $L_x \times L_y \times L_z$ avec une r solution spatiale $\Delta = a/4,9$ maintenue constante. Le nombre de mailles du calcul  volue donc avec la taille du domaine. Pour un domaine $L_x = L_y = L_z = 20a$ (un choix largement usit  par la suite), cela correspond   97^3 mailles au total. Dans toutes les simulations pr sent es, les  quations de Stokes seront r solv es. Le pas de temps typique est de l'ordre de $10^{-3} \dot{\gamma}^{-1}$ mais sera r duit   $0,5 \times 10^{-3} \dot{\gamma}^{-1}$ pour les cas avec frottement. Cette diminution est pr f rable pour bien r soudre l' volution temporelle rapide des forces tangentielles comme cela l'a d j   t  discut  en §6.6.4.

Les conditions limites seront toujours p riodiques dans les directions de la vitesse et de la vorticit . Dans la direction \mathbf{e}_y , des conditions limites de type paroi   vitesse impos e (selon \mathbf{e}_x) sont utilis es. Des vitesses oppos es aux parois sup rieure et inf rieure permettent d'imposer un cisaillement de taux $\dot{\gamma}$. L' coulement obtenu est de type Couette dans un canal de hauteur L_y .

La configuration initiale des particules est un arrangement al atoire de sph res dures en  quilibre,   la fraction volumique ϕ d sir e, obtenue par un algorithme de Monte-Carlo  crit pour l'occasion et adapt  de Torquato (2002).

Les temps de simulation sont g n ralement de l'ordre de 150   200 $\dot{\gamma}^{-1}$. Les d formations initiales jusqu'  50 sont syst matiquement  cart es afin de laisser l' coulement atteindre un r gime stationnaire en moyenne. Les statistiques sont donc r alis es sur des d formations de 100   150, valeurs typiques retrouv es dans la litt rature (Drazer *et al.*, 2004; Sierou et Brady, 2002; Yeo et Maxey, 2010b). Une dispersion statistique est estim e comme dans Sierou et Brady (2002) en d coupant cette dur e utile en cinq intervalles ind pendants de 20   30 $\dot{\gamma}^{-1}$ chacun. Sur chaque intervalle, les grandeurs rh ologiques sont moyenn es. L' cart-type sur la moyenne de ces cinq intervalles est calcul  puis divis  par $\sqrt{5}$, ce qui permet d'obtenir une dispersion statistique qui sera mat rialis e par des barres d'erreur sur les r sultats. Cette dispersion est typiquement de l'ordre de 1 % pour la viscosit  η_s , 2   4 % pour N_2 et peut atteindre 5   10 % pour N_1 et Π , selon la fraction volumique. Les temps de calcul typiques pour un domaine de $(20a)^3$ sont de l'ordre d'une semaine.

Concernant le calcul des propri t s rh ologiques, nous rappelons que la contrainte moyenne pour une suspension de particules rigides soumise   un taux de d formation E_{ij}^∞ s' crit (Batchelor et Green, 1972b)

$$\Sigma_{ij} = -P^f \delta_{ij} + 2\eta E_{ij}^\infty + \Sigma_{ij}^p \quad (8.1)$$

où Σ_{ij}^p représente la contribution des particules à la contrainte dans la suspension et qui est fournie par

$$\Sigma_{ij}^p = \Sigma_{ij}^h + \Sigma_{ij}^c \quad (8.2)$$

avec

$$\Sigma_{ij}^h = n \langle S_{ij}^h \rangle \quad (8.3)$$

$$\Sigma_{ij}^c = n \langle S_{ij}^c \rangle \quad (8.4)$$

où S_{ij}^h est le stresslet hydrodynamique (Eq. (6.81)) incluant la correction de lubrification, S_{ij}^c le stresslet de contact (Eq. (6.95)), n le nombre de particules par unité de volume et $\langle \cdot \rangle$ dénote la moyenne d'ensemble. Cette séparation de Σ_{ij}^p en sa partie hydrodynamique Σ_{ij}^h et de contact Σ_{ij}^c sera largement utilisée par la suite. Notons que la contrainte particulaire est identifiée à sa partie symétrique (stresslet) : les parties antisymétriques des tenseurs des contraintes hydrodynamiques et de contact se compensent en effet en l'absence d'inertie.

Pour un écoulement de cisaillement simple, la viscosité relative de la suspension $\eta_r = \eta_s/\eta$ est donnée par

$$\eta_r = 1 + \frac{\Sigma_{xy}^p}{\eta \dot{\gamma}} \quad (8.5)$$

Les différences de contraintes normales sont calculées par

$$N_1 = \Sigma_{xx}^p - \Sigma_{yy}^p \quad (8.6)$$

$$N_2 = \Sigma_{yy}^p - \Sigma_{zz}^p \quad (8.7)$$

et la pression particulaire

$$\Pi = -\frac{1}{3}(\Sigma_{xx}^p + \Sigma_{yy}^p + \Sigma_{zz}^p) \quad (8.8)$$

8.1.3 Zones de cœur et zones de paroi

Comme il l'a été souligné, tous les calculs de ce travail considèrent une suspension confinée entre deux parois. La périodicité de l'écoulement n'est imposée que dans les directions de l'écoulement x et de la vorticité z , les quantités moyennes dépendent donc de la position verticale y . Comme proposé par Yeo et Maxey (2010b), il est possible de définir une fraction volumique locale $\langle \phi(y) \rangle$ par

$$\langle \phi(y) \rangle = \frac{1}{L_x L_z} \langle \iint \chi(\mathbf{x}) dx dz \rangle \quad (8.9)$$

où $\chi(\mathbf{x})$ est une fonction indicatrice de particule valant 1 dans la particule et 0 ailleurs. Plus précisément, la fraction $\langle \phi(y) \rangle$ définie par Eq. (8.9) est une moyenne surfacique mais un résultat de stéréologie (principe de Delesse) indique que cette quantité est égale à la fraction volumique. La Figure 8.1 présente un exemple de fraction locale $\langle \phi(y) \rangle$ pour trois fractions volumiques moyennes ϕ_{bulk} dans le cas d'une hauteur de canal $L_y = 20a$. Ces simulations sont réalisées avec des particules non-frottantes de rugosité réduite $\xi_{rug} = 5 \cdot 10^{-3}$. Des résultats de simulation de Yeo et Maxey (2010b) pour $\phi_{bulk} = 0,4$ sont également ajoutés. Il apparaît distinctement des pics près des parois qui trahissent la présence d'une structuration dans cette région, structuration par ailleurs attestée par d'autres simulations (Kromkamp *et al.*, 2006; Yeo et Maxey, 2010b) ainsi que par des expériences (Blanc, 2011). Dans le cas présent $L_y = 20a$, et pour des fractions moyennes ϕ_{bulk} inférieures à 0,5, il existe néanmoins toujours une région homogène au centre de l'écoulement où la fraction est relativement constante. A l'opposé, la simulation à $\phi_{bulk} = 0,5$ montre que les effets de paroi dominent toute la suspension.

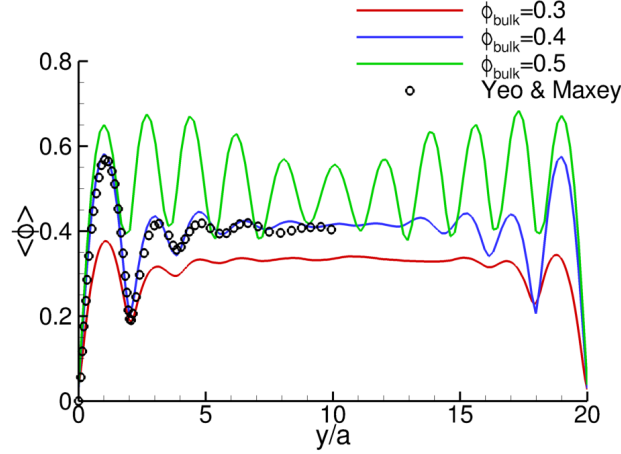


Fig. 8.1 – Fraction volumique locale $\langle\phi(y)\rangle$ pour $L_y = 20a$ et trois fractions volumiques moyennes ϕ_{bulk} . Sont également représentés des résultats de simulations (Yeo et Maxey, 2010b).

Nous dénommerons **zone de cœur** \mathcal{D}_{core} , cette région centrale de la suspension dépourvue d'effets de paroi. La suspension y est homogène et se comporte comme dans un domaine infini (Yeo et Maxey, 2010b). Au contraire, la **zone de paroi** \mathcal{D}_{wall} est la région complémentaire, complètement gouvernée par les interactions avec la paroi. Cette distinction sera utile par la suite pour étudier séparément le comportement d'une suspension homogène (non-confinée) et celui d'une suspension affectée par les parois. Dans le cas du rôle du frottement par exemple – abordé un peu plus tard au chapitre 9 –, il nous a ainsi semblé plus pertinent d'étudier une suspension homogène dans un premier temps avant d'y ajouter une complexité additionnelle liée à l'effet des parois.

Nous choisissons ces deux zones \mathcal{D}_{core} et \mathcal{D}_{wall} de la manière suivante

$$\mathcal{D}_{core} = \{[0, L_x]\} \times \{[L_y/4, 3L_y/4]\} \times \{[0, L_z]\} \quad (8.10)$$

$$\mathcal{D}_{wall} = \{[0, L_x]\} \times \{[L_y, L_y/4] \cup [3L_y/4, L_y]\} \times \{[0, L_z]\} \quad (8.11)$$

Le domaine physique \mathcal{D} est la somme de ces deux domaines : $\mathcal{D} = \mathcal{D}_{core} \oplus \mathcal{D}_{wall}$. Ce choix suit celui des travaux de Yeo et Maxey (2010b) et correspond, pour un confinement $L_y = 20a$, à définir le cœur de la suspensions par $5 < y/a < 15$.

Du fait de ce confinement, la fraction volumique moyenne ϕ_{core} dans le cœur de l'écoulement peut légèrement différer de la fraction moyenne globale ϕ_{bulk} , typiquement de quelques %. C'est cette valeur ϕ_{core} qui sera considérée pour définir la fraction volumique dès lors que l'on s'intéresse à la rhéologie dans le cœur de la suspension. Pour la même raison, le cisaillement à cœur $\dot{\gamma}_{core}$ et le cisaillement moyen imposé $\dot{\gamma}_{bulk}$ ne sont a priori pas strictement égaux et c'est la valeur $\dot{\gamma}_{core}$ qui sera retenue pour calculer les propriétés rhéologiques à cœur, par exemple la viscosité relative η_r (Eq. (8.5)). Ces aspects seront abordés plus en détail dans la partie traitant du rôle du confinement (Chapitre 10).

Les raisons motivant ce choix des parois ont été fournies précédemment en §8.1.1. Au vu des résultats de la Fig. 8.1, les fractions volumiques élevées vont nécessiter l'emploi de domaines assez grands si l'on souhaite étudier une suspension homogène. Cependant, pour les fractions volumiques supérieures à 0,5, les suspensions monodisperses se structurent même en conditions totalement périodiques et donc en l'absence de parois (Kulkarni et Morris, 2009; Sierou et Brady, 2002). Dans ce cas, une amélioration ne consisterait pas prioritairement à s'affranchir des parois mais plutôt à considérer des suspensions polydisperses. Lorsque des résultats de suspension homogène seront présentés (rhéologie à cœur), nous avons vérifié que ceux-ci sont indépendants de la taille du domaine et qu'ils ne sont donc pas affectés par les parois.

8.2 Etudes paramétriques préliminaires

Avant d'exploiter pleinement les simulations numériques pour en tirer des informations pertinentes en rhéophysique des suspensions, il est nécessaire de procéder à quelques études paramétriques dont le but est d'évaluer la sensibilité des résultats à des paramètres peu connus et ainsi d'en fixer les valeurs pour le reste des simulations à venir. Les trois grandeurs étudiées ici sont la taille du domaine (et le nombre de particules), la dissipation mécanique et la raideur mécanique. Un dernier point concernera la modélisation de la lubrification.

Dans le cadre de cette étude paramétrique, toutes les simulations sont effectuées pour une hauteur de canal $L_y=20a$ (une valeur largement utilisée par la suite) ainsi qu'à une fraction volumique $\phi_{bulk}=0,4$.

8.2.1 Taille du domaine et nombre de particules

Un nombre insuffisant de particules peut donner lieu à une suspension qui n'est pas statistiquement représentative, d'où un effet attendu du nombre N_p de particules. La taille du domaine a quant à elle un effet numérique lié à l'imposition des conditions de périodicité qui peuvent potentiellement modifier le développement ou la structure de la suspension. Rappelons que la hauteur L_y est ici fixée (le chapitre sur le confinement reviendra sur son rôle important) et par taille du domaine, nous entendons les longueurs L_x et L_z dans les directions homogènes.

A fraction volumique fixée, taille du domaine et nombre de particules sont évidemment liés. Nous cherchons néanmoins ici à séparer ces deux effets et à en étudier le rôle respectif. L'effet du nombre de particules a été évalué en particulier par dynamique stokésienne (Sierou et Brady, 2002). Ces travaux montrent que les grandeurs rhéologiques sont relativement peu sensibles au nombre N_p de particules dans leur cas ($\phi=0,4$ et N_p entre 125 et 1000) et la valeur $N_p=512$ y est finalement choisie. Le rôle de la taille du domaine n'a par contre pas été considéré.

Il reste cependant difficile de séparer ces deux contributions puisqu'à fraction volumique imposée, une modification du volume du domaine change nécessairement le nombre de particules. Nous émettons l'hypothèse que l'effet de la taille L_z , dans la direction de la vorticit , est faible car les particules n'interagissent que tr s peu dans cette direction. Au contraire, la condition de p riodicit  en x a potentiellement un r le plus important puisque l' coulement moyen est selon cette direction. Ainsi, l'effet de L_z (  iso- L_x) sera un bon indicateur de l'effet du nombre de particules tandis que l'effet de L_x (  iso- L_z) aidera   quantifier l'effet de la condition limite de p riodicit  en x .

Des r sultats de simulation pour la viscosit  relative de la suspension η_r sont pr sent s en Tab. 8.1 (pour l'effet de L_z) et en Tab. 8.2 (pour l'effet de L_x). Ces calculs sont r alis s   $\phi_{bulk}=0,4$ pour des particules non-frottantes de rugosit  r duite $\xi_{rug}=5.10^{-3}$. La viscosit  est calcul e dans tout le domaine \mathcal{D} .

D'apr s Tab. 8.1, l'effet de L_z sur la viscosit  – et donc l'effet de N_p en vertu de notre hypoth se – est indiscernable de l'erreur statistique. Nous pouvons en d duire que la rh ologie de la suspension est ind pendante du nombre de particules pour $N_p \gtrsim 400$, en coh rence avec les r sultats de Sierou et Brady (2002).

Les r sultats pr sent s en Tab. 8.2 montrent par contre un effet sensible sur la viscosit  pour $L_x/a=10$, effet qui n'est donc pas imputable au nombre r duit de particules. Il s'agit ici v ritablement d'un effet de taille du domaine : la longueur de p riodicit  semble insuffisante pour simuler une suspension infinie ce qui modifie probablement la configuration des particules, m me si ce dernier point n'a pas  t   tudi  plus en d tail.

Ces r sultats pr nent donc le choix suivant : $L_x/a=20$ et $L_z/a=20$, choix qui sera fait pour la grande majorit  des calculs pr sent s par la suite. On veillera  galement toujours   conserver au minimum $N_p \gtrsim 400\sim 500$ particules dans les r gimes   faible fraction volumique. Pour ce faire, la

longueur L_x sera augmentée.

Cette étude n'a toutefois été réalisée qu'à une fraction volumique unique et nous extrapolons ces conclusions aux autres fractions. Les résultats sont uniquement présentés en termes de viscosité mais l'effet est qualitativement identique sur les autres grandeurs rhéologiques.

L_x/a	L_z/a	N_p	η_r
20	10	360	$5,64 \pm 0,10$
20	20	734	$5,67 \pm 0,05$
20	30	1108	$5,66 \pm 0,06$
20	40	1483	$5,66 \pm 0,06$

Tab. 8.1 – Effet de L_z sur η_r ($\phi_{bulk}=0,4$).

L_x/a	L_z/a	N_p	η_r
10	20	360	$5,81 \pm 0,09$
20	20	734	$5,67 \pm 0,05$
30	20	1108	$5,64 \pm 0,06$
40	20	1483	$5,65 \pm 0,08$

Tab. 8.2 – Effet de L_x sur η_r ($\phi_{bulk}=0,4$).

8.2.2 Dissipation mécanique

Les particules sont constituées d'un matériau supposé viscoélastique et leur déformation induit une dissipation mécanique lors du contact. La composante dissipative de la force normale de contact est modélisée par le terme $\gamma_n \delta$ avec δ la vitesse normale relative. Le terme d'amortissement γ_n est généralement exprimé en fonction du coefficient de restitution normal e , voir Eq. (6.102).

L'effet du coefficient de restitution normal e a été évalué et les résultats obtenus sur la viscosité sont présentés en Tab. 8.3. Ces simulations sont menées à $\phi_{bulk}=0,4$ pour des particules non-frottantes de rugosité réduite $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

e	η_r
1	$5,67 \pm 0,05$
0,8	$5,68 \pm 0,05$
0,5	$5,66 \pm 0,05$
0,2	$5,72 \pm 0,06$
0	$5,63 \pm 0,04$

Tab. 8.3 – Effet du coefficient de restitution e sur la viscosité relative ($\phi_{bulk}=0,4$).

Le rôle du coefficient de restitution e est particulièrement faible et les écarts notés sont peu significatifs au vu de l'erreur statistique. Pour les plus faibles valeurs ($e=0$ et $e=0,2$), un léger effet peut être remarqué mais il semble difficile de conclure. Pour ces deux configurations, on peut calculer $\gamma_n \approx 51$ (pour $e=0,2$) et $\gamma_n \approx 112$ (pour $e=0$). Ces valeurs de dissipation sont à comparer à celle induite par la lubrification qui s'écrit ici pour la force normale $3\pi\eta a/2\xi_{rug} \approx 94$ (en supposant que la distance entre particules reste égale à la rugosité). Ces estimations sont cohérentes avec un effet de e potentiellement visible entre 0 et 0,2 car dans ce cas, la dissipation mécanique est de l'ordre de grandeur de la dissipation par lubrification.

L'effet est malgré tout extrêmement peu marqué et le choix de e n'a que peu d'importance. Dans tous les calculs qui suivront, **la valeur $e=1$ sera choisie**. C'est de plus celle qui est attendue pour les collisions à faibles vitesses relatives, ce que confirme un grand nombre d'expériences, voir par exemple Labous *et al.* (1997). Ceci implique que pour les suspensions à faibles Reynolds, la dissipation mécanique pendant le contact est négligeable. Cette conclusion sur l'effet de e confirme certains résultats (Gondret *et al.*, 2002; Simeonov et Calantoni, 2012) démontrant que pour des contacts lubrifiés à faibles nombres de Stokes, la majeure partie de l'énergie est dissipée uniquement via la lubrification. Les résultats expérimentaux de Gondret *et al.* (2002) sur des collisions particule-paroi montrent ainsi que pour des nombres de Stokes $St < 10$, il n'y a pas de rebond quel que soit

le coefficient de restitution. C'est dans ce cas la dissipation visqueuse et non pas mécanique qui empêche le rebond, ce qui confirme la prédominance de la dissipation du fluide.

8.2.3 Raideur mécanique

Comme cela a été détaillé dans la partie numérique, la raideur mécanique K_n peut être exprimée en fonction des propriétés mécaniques de la particule mais cela conduit généralement à des valeurs très importantes qui posent quelques problèmes numériques (ceci nécessiterait notamment de diminuer très notablement le pas de temps). Pour contourner cette difficulté, nous avons proposé de diminuer arbitrairement cette raideur et de l'exprimer en termes d'une déformation caractéristique de la rugosité $\bar{\epsilon} = |\bar{\delta}|/h_{rug}$. En égalant la force de contact avec une force hydrodynamique (en régime dilué) $F_{hyd}^0 = 6\pi\eta a^2 \dot{\gamma}$, il est possible de déduire une valeur de K_n à partir de cette déformation caractéristique $\bar{\epsilon}$, voir Eq. (6.98). Dit autrement, la raideur K_n est calculée de telle manière à ce que la déformation maximale de la rugosité soit $\bar{\epsilon}$ sous la force moyenne F_{hyd}^0 .

Les résultats suivants (Tab. 8.4) présentent l'évolution de la viscosité relative pour différentes valeurs de $\bar{\epsilon}$. Les simulations sont réalisées à $\phi_{bulk}=0,4$ pour des particules non-frottantes de rugosité réduite $\xi_{rug}=h_{rug}/a=5.10^{-3}$. Pour des suspensions denses cependant, la force hydrodynamique moyenne exercée sur les particules est plus grande que F_{hyd}^0 . Il en découle que la déformation moyenne effective des rugosités $\langle\epsilon\rangle = \langle|\delta|\rangle/h_{rug}$ sera un peu plus élevée que la déformation caractéristique $\bar{\epsilon}$ attendue. Cette valeur $\langle\epsilon\rangle$ est calculée en moyennant les déformations relatives $|\delta|/h_{rug}$ sur tous les contacts et est présentée dans la dernière colonne de Tab. 8.4.

$\bar{\epsilon}$ (%)	η_r	$\langle\epsilon\rangle$ (%)
1	$5,72 \pm 0,04$	1,7
2	$5,70 \pm 0,04$	3,4
5	$5,67 \pm 0,05$	8,3
10	$5,68 \pm 0,05$	16,4
20	$5,79 \pm 0,05$	32,0

Tab. 8.4 – Effet de la déformation caractéristique de la rugosité $\bar{\epsilon}$ sur la viscosité relative ($\phi_{bulk}=0,4$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$). La grandeur $\langle\epsilon\rangle$ représente la déformation de la rugosité effectivement constatée.

Seule la plus grande déformation $\bar{\epsilon}=20$ % induit un écart tout juste significatif sur la viscosité. Notons que les effets sur les autres grandeurs rhéologiques sont qualitativement similaires. Pour ce choix de valeur, la rugosité devient plus « molle » et la distance effective h entre particules est alors plus faible que pour une rugosité très raide ($\bar{\epsilon} \ll 1$) où l'on attend $h=h_{rug}$. Du fait de cette diminution de la distance interparticulaire, la dissipation due à la lubrification augmente, de même que la viscosité. Pour $\bar{\epsilon} \lesssim 10\%$, il n'y a pas d'effet notable et dans toutes les simulations à venir, **la valeur $\bar{\epsilon}=5\%$ sera choisie.**

Les résultats présentés indiquent également que la déformation effective calculée $\langle\epsilon\rangle$ des rugosités est, comme attendu, un peu plus élevée que la valeur $\bar{\epsilon}$ et ce, d'un facteur 1,7. Comme une loi de Hertz est utilisée ($F_n^c \propto |\delta|^{3/2}$), cela signifie qu'à $\phi_{bulk}=0,4$ la force hydrodynamique moyenne exercée sur les particules est en fait $(1,7)^{3/2} \approx 2,2$ plus grande que F_{hyd}^0 . La valeur moyenne de la déformation $\langle\epsilon\rangle$ sera calculée systématiquement lors des simulations et, même pour les suspensions les plus denses, on note dans tous les cas $\langle\epsilon\rangle \lesssim 10\%$ d'où une absence attendue d'effet de la raideur mécanique sur la rhéologie calculée. Cette variation modérée de $\langle\epsilon\rangle$ est liée à la non-linéarité du contact de Hertz, dont la raideur K_n augmente avec $|\delta|^{1/2}$, ce qui tend à limiter les déformations importantes.

L'intérêt d'un contact de Hertz ($K_n \propto |\delta|^{1/2}$) par rapport à un contact linéaire (K_n constant) est illustré sur la figure suivante. La Fig. 8.2(a) présente la densité de probabilité (pdf) de la force normale de contact F_n^c adimensionnée par F_{hyd}^0 pour une suspension à $\phi_{bulk}=0,4$ pour des particules non-frottantes de rugosité réduite $\xi_{rug}=h_{rug}/a=5.10^{-3}$. Ce résultat montre que la distribution de force est relativement insensible au choix du modèle de contact entre loi de Hertz et loi linéaire. Cette distribution est de forme exponentielle, un caractère typique des granulaires secs et censé attester de la présence de chaînes de forces dans le réseau (Radjai *et al.*, 2010). Cette dernière étude montre que la distribution p des forces normales dans un milieu granulaire suit toujours une loi de type

$$p = \exp\left(-\beta \frac{F_n^c}{\langle F_n^c \rangle}\right) \quad (8.12)$$

avec $\beta \approx 1,4$. Une régression des résultats de la Fig. 8.2(a) fournit $\beta \approx 1$. Il semble ainsi s'esquisser une similarité de la distribution des forces normales entre une suspension et un milieu granulaire.

La Fig. 8.2(b) montre pour cette même simulation la distribution de la déformation relative des rugosités $\epsilon = |\delta|/h_{rug}$ avec cette fois une nette différence entre les deux modèles de contact. Les déformations pour le modèle linéaire possèdent une répartition très large, en lien direct avec la distribution exponentielle des forces dans le réseau. Le caractère non-linéaire du modèle de Hertz permet de limiter cet étalement. Le mode de la distribution est proche de 5 % (valeur matérialisée en pointillés bleus), qui est ici la valeur de $\bar{\epsilon}$. La valeur moyenne est par contre de 8,3 % (cf. Tab. 8.4) avec des valeurs extrêmes puisque certaines des rugosités sont déformées d'environ 20 voire 30 % (mais beaucoup plus dans le modèle linéaire).

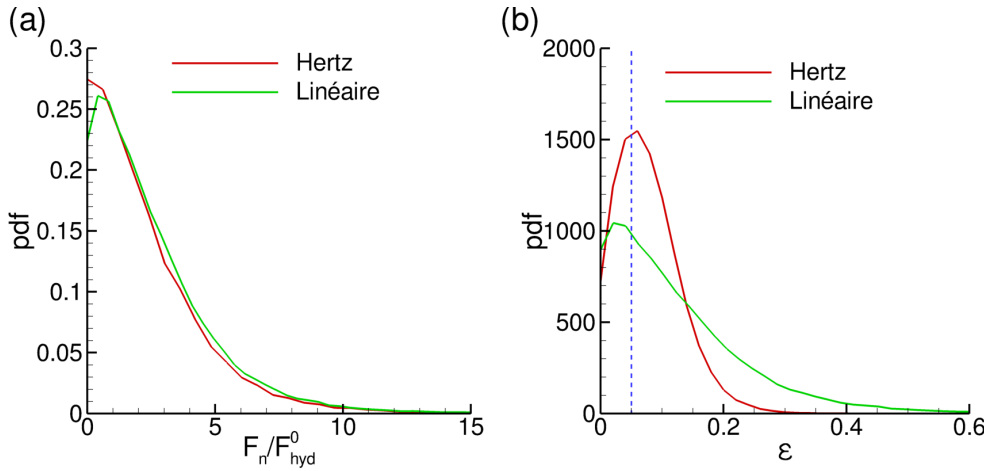


Fig. 8.2 – Distribution de F_n^c/F_{hyd}^0 (a) et de la déformation de la rugosité ϵ (b) à $\phi_{bulk}=0,4$: modèle de Hertz et modèle linéaire. La ligne en pointillés bleus est la valeur choisie de $\bar{\epsilon}=0,05$.

Une grandeur importante est le paramètre $\dot{\Gamma}$ qui exprime le rapport entre les forces hydrodynamiques liées au cisaillement et les forces de contact. Il s'exprime via Eq. (6.99), soit $\dot{\Gamma} = 6\pi\eta a^2 \dot{\gamma}/F_0$ avec F_0 la force nécessaire à déformer complètement une rugosité $F_0 = K_n(h_{rug})h_{rug}$. Notre choix de modèle mécanique implique que $\dot{\Gamma} = \bar{\epsilon}^{3/2}$ (Eq. (6.100)). Ainsi, les études paramétriques présentées en Tab. 8.4 montrent qu'entre $\bar{\epsilon}=1\%$ ($\dot{\Gamma}=10^{-3}$) et $\bar{\epsilon}=10\%$ ($\dot{\Gamma} \approx 3.10^{-2}$), la viscosité n'évolue pas et que la suspension ne présente pas de rhéofluidification. Pour $\bar{\epsilon}=20\%$ ($\dot{\Gamma} \approx 9.10^{-2}$), on note un rhéoépaississement minime pour des raisons qui ont déjà été évoquées. Des valeurs de $\dot{\Gamma}$ inférieures à 10^{-3} n'ont pas été testées mais l'on s'attend à conserver des résultats similaires puisque l'on reste dans un régime asymptotique de sphères dures.

Ceci signifie que tous les résultats qui seront présentés dans le cadre de ce travail (à $\bar{\epsilon}=5\%$, soit $\dot{\Gamma} \approx 10^{-2}$) restent valables dans une large gamme de $\dot{\Gamma}$, typiquement $10^{-3} \sim 10^{-1}$. Cette conclusion est

également valable pour les contraintes normales.

8.2.4 Taille des rugosités

Poursuivons ces études paramétriques avec le rôle des rugosités. Cette section sera ici un peu plus détaillée puisque, contrairement aux paramètres précédents qui n'avaient que peu d'effets, la rugosité des particules modifie sensiblement la rhéologie des suspensions. L'étude nécessite alors de s'intéresser à d'autres grandeurs rhéologiques que la viscosité, comme les contraintes normales. Les simulations sont toujours effectuées à $\phi_{bulk}=0,4$ pour des suspensions non-frottantes et toutes les grandeurs rhéologiques présentées sont calculées dans la zone de cœur \mathcal{D}_{core} où le rôle des parois est négligeable.

La Fig. 8.3 présente la viscosité relative (a) et les différences de contraintes normales (b) en fonction de la rugosité réduite $\xi_{rug} = h_{rug}/a$ pour des particules non-frottantes. En Fig. 8.3(a), la viscosité est décomposée en sa partie hydrodynamique η^h et sa partie contact η^c , comme suggéré par Eq. (8.2). Ceci s'écrit $\eta_r = \eta^h + \eta^c$ avec la viscosité du fluide seul (le 1 de Eq. (8.5)) comptée dans la partie hydrodynamique.

La viscosité relative η_r diminue de manière monotone quand la rugosité croît (Fig. 8.3(a)). Les parties hydrodynamique et de contact varient de manière similaire si bien que leur contribution à la viscosité reste constante et indépendante de la rugosité avec ici $\eta^h/\eta_r \approx 0,68$ et $\eta^c/\eta_r \approx 0,32$. La contribution hydrodynamique η^h diminue quand la rugosité augmente car la distance entre particules est plus élevée et la dissipation par lubrification plus faible. La diminution de η^c peut certainement être expliquée par l'équilibre entre les forces de contact et les forces hydrodynamiques sur les particules. L'évolution de viscosité reste au final assez modeste avec une diminution d'environ 20 % pour une augmentation d'un facteur 100 de la taille de la rugosité. Cet effet limité de la rugosité est également noté dans des simulations de SD (Sierou et Brady, 2002; Singh et Nott, 2000) et de FCM (Yeo et Maxey, 2010b). Soulignons que dans ces simulations, il n'y a pas à proprement parler de rugosité; la force de répulsion utilisée a toutefois une portée, portée qui peut être vue comme une sorte de rugosité.

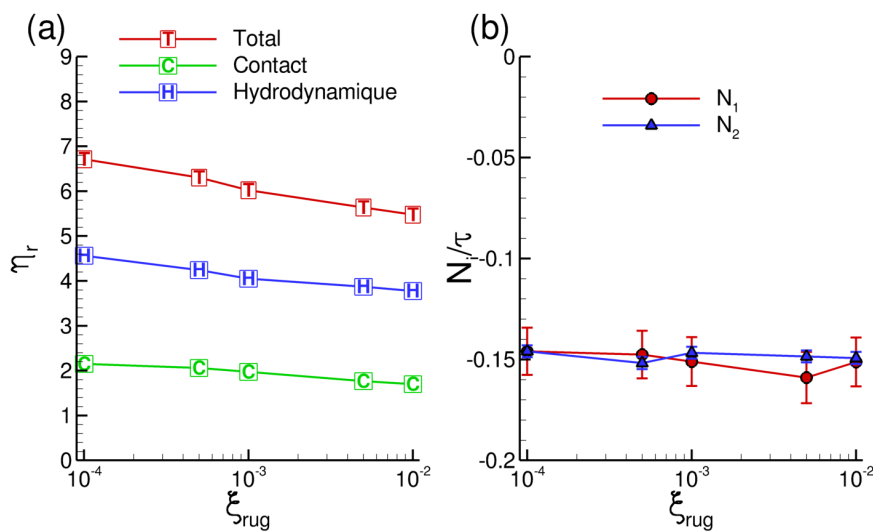


Fig. 8.3 – Viscosité relative (a) et différences de contraintes normales (b) en fonction de la rugosité réduite ξ_{rug} pour $\phi_{bulk}=0,4$ et $\mu_d=0$. La viscosité relative totale ("T") est décomposée en partie hydrodynamique ("H") et contact ("C").

La Fig. 8.3(b) présente les différences de contraintes normales N_1 et N_2 normalisées par la contrainte de cisaillement $\tau = \eta_r \eta \dot{\gamma}$. Les valeurs de N_1 et N_2 sont toutes deux négatives et possèdent des valeurs similaires $N_1/\tau \approx N_2/\tau \approx -0,15$ en bon accord avec les simulations SD de Sierou et Brady (2002) qui fournissent $N_1/\tau \approx N_2/\tau \approx -0,135$. Un résultat intéressant est que N_1/τ et N_2/τ semblent indépendants de la rugosité. Ceci signifie toutefois qu'à mesure que les rugosités augmentent, les valeurs de $|N_1|$ et $|N_2|$ décroissent légèrement (puisque τ diminue). Cette tendance est en accord qualitatif avec des simulations bidimensionnelles de Wilson et Davis (2002) qui montrent qu'en régime concentré $|N_1|$ diminue pour les grandes rugosités (mais l'effet inverse se produit en régime dilué). Notons au passage que la rugosité ne modifie en aucun cas le rapport N_2/N_1 qui reste de l'ordre de 1 et ce, contrairement aux résultats expérimentaux. Il semble ainsi que la rugosité de surface des particules ne puisse pas – à elle seule – expliquer des valeurs expérimentales $|N_1| \ll |N_2|$. Au plus, les rugosités pourraient induire quelques écarts limités entre différentes expériences.

Les simulations tridimensionnelles étudiant le rôle de la rugosité (ou plus précisément de la portée de la force interparticulaire en SD et FCM) ne sont pas légion. Sierou et Brady (2002) ont évalué par SD l'effet de la rugosité mais uniquement sur la pression particulaire Π . Ces derniers notent que Π est relativement constant, ce qui implique une augmentation modérée de 25 % de Π/τ quand la portée de la force est augmentée de 10^{-4} à 10^{-2} . Nos résultats s'avèrent proches des leurs avec Π qui varie très peu et une augmentation de Π/τ de 35 % pour des rugosités entre 10^{-4} et 10^{-2} , comme le montre la Fig. 8.4(a). Une tendance semblable est notée pour les contraintes normales Σ_{ii}^p avec une augmentation limitée de $|\Sigma_{ii}^p|/\tau$ avec la rugosité (Fig. 8.4(b)). Il est intéressant de souligner que cette variation est similaire pour les trois contraintes, ce qui résulte en des différences N_1/τ et N_2/τ relativement peu affectées par la présence des rugosités. Le fait que les simulations (les nôtres mais aussi celles de Sierou et Brady (2002)) prédisent des contraintes normales ou des pressions particulières constantes contraste avec des prédictions théoriques de Brady et Morris (1997) selon lesquelles les contraintes normales varient avec $\xi_{rug}^{0,22}$. Ce désaccord, déjà souligné par Singh et Nott (2000), n'a pas été étudié plus en détail dans ce travail. Il est possible que cette théorie ne soit valide que dans le cas dilué, régime dans lequel elle a été développée.

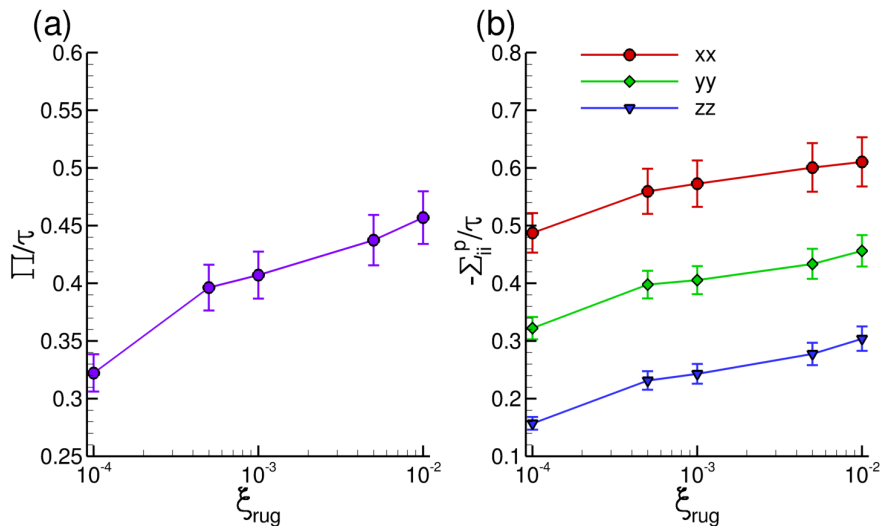


Fig. 8.4 – Pression particulaire Π/τ (a) et contraintes normales $-\Sigma_{ii}^p/\tau$ (b) en fonction de la rugosité réduite ξ_{rug} pour $\phi_{bulk}=0,4$ et $\mu_d=0$.

Notons que dans notre modèle, le paramètre $\tilde{\Gamma}$ reste constant quelle que soit la rugosité, ce qui implique que $K_n(h_{rug})h_{rug}$ est également maintenu constant. Dans le cas de particules parfaitement

lisses ($h_{rug}=0$), ceci conduit à une indétermination. Toutefois, des simulations de sphères sans rugosités n'ont pas été menées.

Des calculs complémentaires ont également été effectués pour une autre fraction volumique, à $\phi_{bulk}=0,2$. Le rapport des différences de contraintes normales sur la contrainte de cisaillement prend une valeur différente ($N_1/\tau \approx N_2/\tau \approx -0,03$) mais qui reste indépendante de la rugosité. Le fait que les différences N_1/τ et N_2/τ ne dépendent pas de la rugosité pourrait suggérer que les contraintes normales persistent même dans la limite d'une rugosité nulle. Encore une fois, ce cas non réaliste de sphères infiniment lisses n'a pas été étudié. Des simulations de suspensions cisailées avec des particules parfaitement sphériques ont toutefois été effectuées par Melrose et Ball (1995). Leurs résultats montrent que cette configuration – qualifiée de « pathologique » – résulte inévitablement en des recouvrements entre particules, donc des contacts, même pour des pas de temps extrêmement petits et des schémas d'intégration d'ordre élevé. En conséquence, nous postulons que des différences de contraintes normales existent – au moins numériquement – dans les suspensions denses de particules parfaitement lisses.

Nous avons aussi évalué l'effet d'un paramètre $\tilde{\Gamma}$ variant avec la rugosité (raideur K_n constante). Dans la gamme testée $10^{-3} \lesssim \tilde{\Gamma} \lesssim 10^{-1}$, les résultats obtenus restent identiques. Ceci signifie que ces N_i/τ constants ne sont pas liés au fait que $\tilde{\Gamma}$ soit indépendant de la rugosité (Eq. (6.100)).

8.2.5 Modèle minimal de lubrification

Nous profitons de ces études paramétriques pour aborder un point important concernant la prise en compte de la lubrification. Notre modélisation reste complexe dans sa formulation (matrice complète de lubrification avec prise en compte de tous les degrés de liberté des particules) mais aussi dans sa mise en œuvre avec une identification, assez lourde, des fonctions de résistance non-résolues. La question est de savoir si cette complexité est justifiée ou si un modèle plus simple de lubrification pourrait suffire. Il s'agit ainsi d'identifier les ingrédients minimaux nécessaires à une prise en compte réaliste des phénomènes. Ce point est d'autant plus crucial que de nombreux travaux recourent à une modélisation assez simple de la lubrification.

Nous rappelons que la correction de lubrification cherche à pallier une prise en compte incomplète des forces de lubrification du fait des maillages trop grossiers pour capter finement l'écoulement entre des particules très proches. Elle corrige les vitesses et stresslets des particules en s'appuyant sur la théorie de la lubrification. Le système à résoudre couple toutes les vitesses des particules (avec une hypothèse d'additivité par paires) et s'écrit en fonction d'un certain nombre de fonctions de résistance $X^<$ avec $X^< = X^{theo} - \tilde{X}$, c'est-à-dire la fonction de résistance théorique X^{theo} à laquelle on retranche la partie \tilde{X} des interactions explicitement résolues par l'approche numérique. Ce sont ces fonctions de résistance \tilde{X} qui doivent être identifiées et pré-tabulées en fonction de la distance réduite $\xi = h/a$ entre particules.

Nous nous proposons d'étudier un certain nombre de simplifications du modèle de base afin d'en dégager la physique minimale à conserver. La configuration simulée est une suspension à $\phi_{bulk}=0,4$ de particules non-frottantes et de rugosité réduite $\xi_{rug}=5.10^{-3}$ pour un confinement $L_y/a=20$.

Les modèles de lubrification évalués sont les suivants :

1. Référence

C'est le modèle de référence complet qui sera utilisé dans toutes les simulations à venir.

2. Pas d'interaction résolue

Les interactions à courte portée explicitement résolues par le code sont négligées. Il s'agit de poser $\tilde{X}=0$ et la correction est donc entièrement basée sur la valeur théorique $X^{theo}(\xi)$, soit $X^< = X^{theo}(\xi)$. Le risque est ici de « surcorriger » car on occulte délibérément que le code capte effectivement une fraction des interactions hydrodynamiques à courte portée. L'on parle

également de "double-counting" dans la mesure où ces dernières vont être comptées deux fois (une fois par la méthode numérique et une fois par la correction).

3. Interaction résolue simplifiée

On s'affranchit ici de la procédure d'identification des interaction résolues \tilde{X} en faisant l'hypothèse que $\tilde{X}=X^{theo}(\Delta)$, soit $X^<=X^{theo}(\xi) - X^{theo}(\Delta)$, pour les distances interparticulaires inférieures à la taille de maille Δ et que $X^<=0$ dans le cas contraire. Ce choix, courant dans un certain nombre de travaux, sous-entend que toutes les interactions sont bien résolues jusqu'à la distance d'une maille mais que plus proche, le code ne capte rien de plus (\tilde{X} ne dépend plus de ξ).

4. Singularités fortes

L'idée est ici de ne conserver que les singularités de lubrification en ξ^{-1} , donc principalement celles des forces normales. Toutes les interactions en $\log \xi$, en particulier liées aux forces tangentielles et à la rotation sont négligées.

5. Singularités fortes + interaction simplifiée

Il s'agit de combiner les deux modèles précédents 3 et 4. Ce choix représente clairement un minimum en termes de modélisation mais s'avère utilisé dans de nombreux travaux. Ce modèle consiste alors principalement à rajouter une force normale $F_n \propto 1/h - 1/\Delta$ quand $h < \Delta$.

Les résultats obtenus pour les grandeurs rhéologiques de la suspension considérée sont consignés dans le Tab. 8.5 pour les différents modèles cités. Notons que ces simplifications de modélisation s'appliquent aux vitesses mais également aux stresslets ainsi qu'aux interactions particule-paroi. Les résultats sont présentés pour la viscosité relative η_r ainsi que les différences de contraintes normales N_1 et N_2 (adimensionnées par $\eta\dot{\gamma}$). Contrairement aux simulations précédentes, ces grandeurs rhéologiques sont calculées dans tout le domaine \mathcal{D} , et pas seulement au cœur, afin d'évaluer d'éventuels effets en paroi.

Modèle	η_r	$N_1/\eta\dot{\gamma}$	$N_2/\eta\dot{\gamma}$
1. Référence	5,65	-0,40	-1,03
2. Pas d'interaction résolue	11,64	+0,19	-2,24
3. Interaction résolue simplifiée	5,40	-0,38	-0,96
4. Singularités fortes	3,88	-0,32	-0,42
5. Sing. fortes + interact. simplif.	3,77	-0,31	-0,40

Tab. 8.5 – Effet du modèle de lubrification sur la viscosité relative η_r et les différences N_1 et N_2 pour une suspension à $\phi_{bulk}=0,4$ ($\mu_d=0$; $L_y/a=20$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$).

Une première remarque concerne l'absence de prise en compte des interactions résolues \tilde{X} (modèle 2). Ce modèle conduit clairement à une mauvaise représentation de la rhéologie de la suspension avec des valeurs très différentes de la référence. En ne prenant pas en compte leur partie explicitement résolue, les interactions de lubrification sont nettement « surcorrigées » et conduisent à ces résultats. Ce choix est donc clairement à proscrire. Notons que l'interaction résolue \tilde{X} dépend fortement de la méthode numérique pour calculer les interactions hydrodynamiques et les résultats dépendent donc de l'approche choisie.

Le meilleur choix consiste en l'approximation $\tilde{X}=X^{theo}(\Delta)$ (modèle 3). Malgré la simplification, ce modèle s'avère retrouver assez fidèlement les résultats attendus. Les grandeurs rhéologiques ou la structuration restent inchangées mais l'on note une surestimation d'environ 30 % des fluctuations de vitesse. L'écoulement global est donc correctement modélisé mais il peut subsister quelques écarts sur les vitesses des particules.

Un résultat important est le rôle des forces tangentielles et de la rotation (modèle 4). Ces dernières sont souvent négligées du fait de leur comportement peu singulier en $\log \xi$. Nos résultats montrent cependant que leur effet est réel avec un impact sensible sur les grandeurs rhéologiques, avec une sous-estimation de la viscosité et de N_2 , mais aussi sur la suspension, en particulier près des parois. L'absence de prise en compte de la lubrification liée aux forces tangentielles en paroi induit un glissement très important et une structuration de toute la suspension, même à $\phi_{bulk}=0,4$. La combinaison des deux modèles précédents (modèle 5) conduit au même résultat. Ils sont donc à éviter pour des simulations quantitatives de rhéologie, surtout en domaine confiné.

Soulignons qu'une simulation sans modèle de lubrification a été réalisée : le calcul est très peu robuste et a nécessité une réduction drastique du pas de temps qui n'a pas permis de terminer la simulation en un temps raisonnable.

En conclusion, une modélisation avancée de la lubrification s'avère nécessaire si l'on souhaite être prédictif et représenter finement la rhéophysique des suspensions concentrées.

SUR LE RÔLE DU FROTTEMENT DANS LES SUSPENSIONS

Sommaire

9.1	Objectifs	145
9.2	Viscosité	146
9.3	Différences de contraintes normales	147
9.4	Contraintes normales	151
9.5	Microstructure	151
9.6	Coefficient de frottement	153
9.7	Lien vers les modèles continus	154
9.8	Rhéologie globale	157
9.9	Diffusion	162
9.9.1	Cisaillement stationnaire	162
9.9.2	Cisaillement oscillant	164
9.10	Ecoulement	168

9.1 Objectifs

Certains travaux antérieurs ont esquissé le rôle potentiel que pouvait jouer le frottement sur la rhéologie des suspensions (Davis *et al.*, 2003; Sierou et Brady, 2002; Wilson et Davis, 2002). Ils restent toutefois préliminaires (modèle de frottement simplifié, étude en 2D ou en dilué, pas ou peu d'études paramétriques,...) et ne permettent pas de quantifier pleinement le rôle du frottement, ni d'en éclaircir les mécanismes. D'autres études plus récentes abordent ce rôle du frottement mais en régime très concentré en rapport avec le blocage ou le rhéoépaississement (Mari *et al.*, 2014; Seto *et al.*, 2013; Wyart et Cates, 2014).

Nous présentons dans ce chapitre une étude – que nous espérons relativement complète – traitant du rôle du frottement sur la rhéologie des suspensions, en balayant une gamme de fraction volumique assez large : $0,1 \leq \phi_{bulk} \leq 0,5$. Chaque section détaillera l'effet du frottement sur un aspect spécifique, comme la viscosité, les contraintes normales ou encore le coefficient de diffusion. A notre connaissance, ce type d'étude détaillée sur le rôle du frottement dans les suspensions n'existe pas dans la littérature.

Toutes les grandeurs rhéologiques sont **estimées en cœur de domaine** afin d'acquérir une vision précise du frottement dans le cadre de suspensions homogènes. Le confinement est fixé à $L_y=20a$ pour toutes les fractions volumiques à l'exception de $\phi_{bulk}=0,45$ et $\phi_{bulk}=0,5$ où les choix respectifs de $L_y=40a$ et $L_y=60a$ sont nécessaires pour conserver une zone de cœur suffisamment grande. Les

résultats obtenus dans le cœur homogène sont indépendants de la hauteur L_y . La taille des rugosités sera fixée à $\xi_{rug}=5.10^{-3}$, qui est une valeur typique pour les particules utilisées dans les expériences sur suspensions modèles (Blanc *et al.*, 2011; Smart et Leighton, 1989).

9.2 Viscosité

La Fig. 9.1 présente la viscosité relative η_r de la suspension en fonction de la fraction volumique pour différents coefficients de frottement μ_d . Quelques mesures expérimentales de Zarraga *et al.* (2000) et Dbouk *et al.* (2013) ont également été ajoutées. Nous rappelons que l'on reporte en abscisse la fraction volumique effective ϕ_{core} mesurée dans le cœur et qui peut différer de ϕ_{bulk} (qui est la valeur moyenne imposée) du fait du confinement. Ceci explique également que, selon le frottement, les différents points ne soient pas exactement à la même fraction volumique.

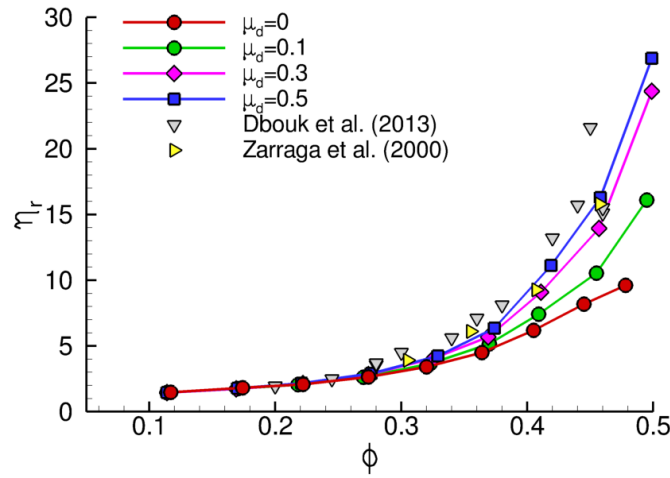


Fig. 9.1 – Viscosité relative η_r en fonction de la fraction volumique pour différents coefficients de frottement μ_d . La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$. Des mesures de Zarraga *et al.* (2000) et Dbouk *et al.* (2013) sont également présentées.

Pour des particules non-frottantes ($\mu_d=0$), l'accord avec les mesures est médiocre avec une sous-estimation systématique de la viscosité expérimentale. Cet effet est constaté de manière récurrente dans toutes les autres simulations en SD et FCM, comme par exemple Sierou et Brady (2002) ou Yeo et Maxey (2010b). La prise en compte du frottement augmente de manière substantielle la viscosité et la corrélation avec les mesures s'en trouve nettement améliorée. Pour $\mu_d=0.5$, l'accord est même plutôt correct. Cet effet du frottement semble plus limité à basse fraction volumique, typiquement $\phi \lesssim 0.3$, probablement du fait d'un nombre plus réduit de particules en contact. Au contraire, pour les suspensions denses, le frottement donne lieu à un accroissement notable de la viscosité.

Ces résultats suggèrent que l'utilisation d'un modèle de contact sans frottement pourrait être à l'origine de la sous-estimation chronique de la viscosité dans les simulations antérieures. Certains auteurs ont parfois suggéré que l'explication était à chercher du côté de la modélisation de la force normale de répulsion. Or, nos études paramétriques précédentes (§8.2) ont montré que l'effet de la raideur est très faible et que la rugosité ne joue que modérément sur la viscosité, en tout cas trop peu pour expliquer un facteur deux.

Sierou et Brady (2002) ont étudié l'impact du frottement sur la rhéologie d'une suspension à $\phi=0.4$ et noté une augmentation limitée d'environ 10 % sur η_r pour $\mu_d=0.5$. L'effet est nettement plus marqué dans nos simulations avec un quasi-doublement de la viscosité. Cette différence quantitative provient probablement de leur modèle de frottement qui était resté volontairement simple à des fins

exploratoires.

Ce rôle du frottement peut être mieux appréhendé en étudiant séparément les composantes hydrodynamique et de contact pour la viscosité, comme nous l'avons déjà fait pour la rugosité (cf. §8.2.4). La Fig. 9.2 présente la partie hydrodynamique (symboles "H") et de contact (symboles "C") de la viscosité relative η_r en fonction de la fraction volumique dans les cas non-frottant ($\mu_d=0$) et frottant ($\mu_d=0,5$). Sur cette figure est également tracée la viscosité à fréquence infinie η_∞^r qui avait été obtenue dans la partie validations (§7.5) par simulation sur une configuration figée de sphères dures en équilibre. Cette viscosité à fréquence infinie est purement d'origine hydrodynamique et correspond à la contribution visqueuse à la contrainte pour une microstructure qui n'est pas affectée par l'écoulement.

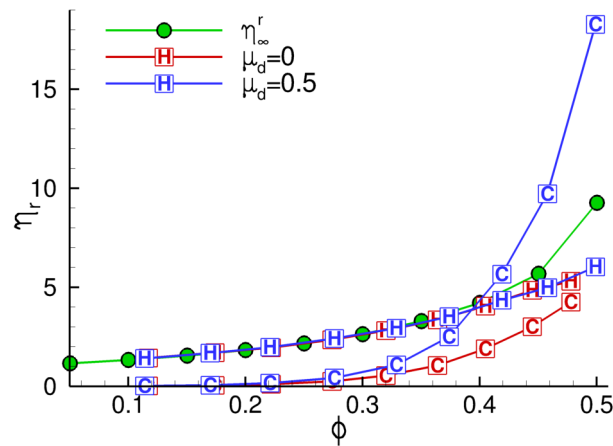


Fig. 9.2 – Contribution hydrodynamique ("H") et de contact ("C") à la viscosité relative η_r en fonction de la fraction volumique et pour des coefficients de frottement $\mu_d=0$ (en rouge) et $\mu_d=0,5$ (en bleu). La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$. La viscosité à fréquence infinie η_∞^r est également représentée.

Un résultat important est que la partie hydrodynamique η^h de la viscosité n'est pas sensible au frottement et l'on voit aisément sur la Fig. 9.2 que ces contributions hydrodynamiques dans les cas frottant et non-frottant se superposent sur une même courbe unique. L'effet du frottement sur η_r est donc uniquement lié à la contribution du contact η^c qui augmente de manière importante avec μ_d .

Un autre point intéressant est que la contribution hydrodynamique η^h est quasi-confondue avec la viscosité à fréquence infinie η_∞^r , du moins pour les fractions modérées $\phi \lesssim 0,4$. Cet accord pourrait sembler fortuit au premier abord dans la mesure où η^h dépend de la rugosité (cf. Fig. 8.3). Il a cependant été souligné que cette dépendance était très limitée pour les rugosités usuelles avec une variation de η^h d'à peine 5 % entre $\xi_{rug}=10^{-3}$ et $\xi_{rug}=10^{-2}$. Ces résultats suggèrent donc l'approximation $\eta^h \approx \eta_\infty^r$, sauf dans les régimes très concentrés. Ceci correspond physiquement à un impact limité de l'anisotropie de la microstructure sur la viscosité hydrodynamique η^h . En conséquence de quoi, la viscosité d'excès ("excess viscosity") $\Delta\eta = \eta_r - \eta_\infty^r$ peut simplement être assimilée à la viscosité de contact, i.e. $\Delta\eta \approx \eta^c$. Soulignons encore une fois que ce résultat ne semble pas valable pour les fractions volumiques très élevées, au-delà de 0,4~0,45.

9.3 Différences de contraintes normales

Les résultats obtenus en termes de différences de contraintes normales, adimensionnées par la contrainte de cisaillement $\tau = \eta_r \eta \dot{\gamma}$, sont présentés en Fig. 9.3 pour différents coefficients de

frottement μ_d . L'effet du frottement sur ces différences de contraintes normales est très marqué avec une réduction de $|N_1|$ et une augmentation de $|N_2|$.

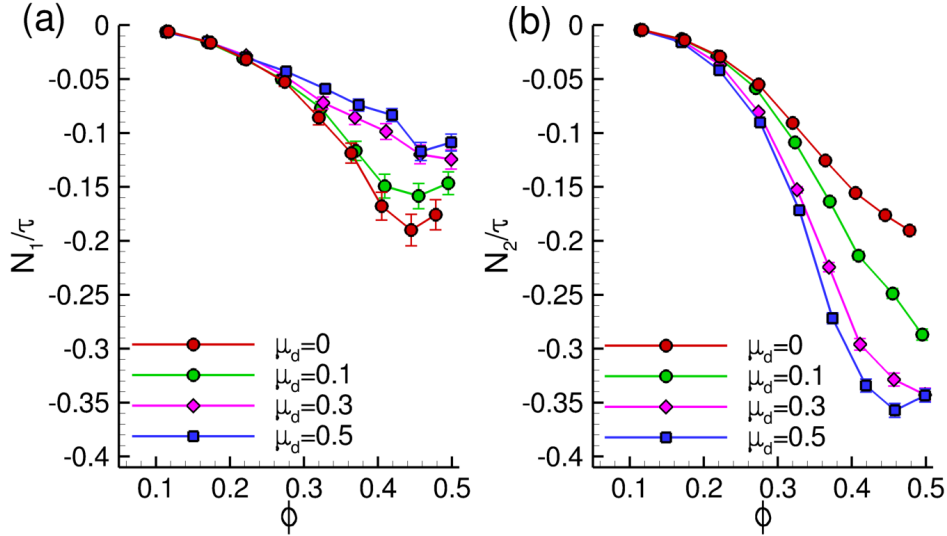


Fig. 9.3 – Différences de contraintes normales N_1/τ (a) et N_2/τ (b) en fonction de la fraction volumique et du coefficient de frottement μ_d . La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

Cet effet est compatible avec les quelques études antérieures sur le rôle du frottement (Sierou et Brady, 2002; Wilson et Davis, 2002). Comme nous l'avons déjà mentionné, des simulations tridimensionnelles de rhéologie avec prise en compte du frottement sont reportées par Sierou et Brady (2002) pour $\phi=0,4$ et $\mu_d=0,5$. Ces auteurs mettent en évidence une réduction de 40 % de $|N_1|$ et une augmentation de 75 % de $|N_2|$. Nos simulations montrent des effets quelque peu différents sur ce même cas avec une réduction de 30 % de $|N_1|$ ainsi qu'un triplement de $|N_2|$. Ces écarts sont probablement imputables au modèle de frottement plus simple utilisé par Sierou et Brady (2002) mais l'on notera cependant des comportements qualitativement similaires. En particulier, l'effet du frottement est nettement plus marqué sur N_2 . Ceci est attendu dans la mesure où les contacts se font principalement dans le plan de cisaillement (x,y) ; de ce fait, le frottement va donner lieu à des contraintes Σ_{xx}^p et Σ_{yy}^p plus élevées, d'où un effet attendu plus important sur $N_2=\Sigma_{yy}^p-\Sigma_{zz}^p$.

Les tendances observées sont intéressantes dans la mesure où les expériences montrent systématiquement une seconde différence N_2 qui est largement plus grande que la première différence N_1 , soit $N_2/N_1 > 1$. La Fig. 9.4 trace nos résultats sous forme du rapport N_2/N_1 en fonction de la fraction volumique et pour différents coefficients de frottement μ_d . En accord avec les simulations de la littérature (SD ou FCM), les particules non-frottantes ($\mu_d=0$) donnent toujours lieu à des rapports $N_2/N_1 \approx 1$ et ce, quasi-indépendamment de la fraction volumique. Pour les fractions très faibles toutefois, on note que N_2/N_1 est légèrement inférieur à l'unité, ce qui semble en accord qualitatif avec les résultats théoriques de Zarraga et Leighton Jr (2001) en régime dilué. Le frottement résulte en un rapport N_2/N_1 plus grand et qui croît globalement avec le coefficient de frottement et la fraction volumique. Pour les régimes denses $\phi \gtrsim 0,4$ et les grands coefficients de frottement $\mu_d \gtrsim 0,3$, le rapport N_2/N_1 est de l'ordre de 3 à 4, ce qui s'avère proche des mesures de Zarraga *et al.* (2000) qui trouvent $N_2/N_1 \approx 3,6$. Une différence avec leurs travaux est toutefois que nos simulations suggèrent que N_2/N_1 possède une dépendance en ϕ , par ailleurs relativement marquée dans la gamme 0,2~0,4. Pour les frottements importants, le rapport N_2/N_1 semble saturer, voire même légèrement diminuer, aux fractions les plus élevées. En deçà de $\phi \approx 0,2$, l'effet du frottement est faible.

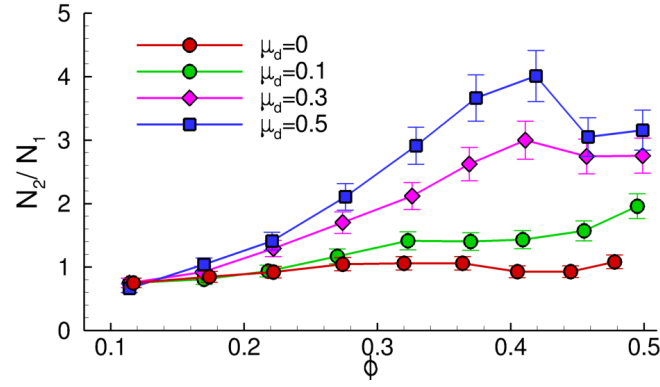


Fig. 9.4 – Rapport N_2/N_1 en fonction de la fraction volumique et du coefficient de frottement μ_d . La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

La corrélation avec les résultats expérimentaux disponibles sur les différences de contraintes normales est présentée en Fig. 9.5 où l'on ne reporte – pour des raisons de clarté – que les résultats avec les coefficients de frottement extrêmes ($\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$).

Les mesures sont relativement cohérentes entre elles pour N_2 et s'avèrent toutes assez proches des résultats obtenus pour les simulations avec frottement. Les conclusions sont moins tranchées pour N_1 dans la mesure où il n'existe pas à l'heure actuelle de consensus clair sur le signe de N_1 . La Fig. 9.5(a) illustre très clairement les écarts expérimentaux sur cette grandeur avec des N_1 tantôt négatifs, tantôt nuls ou positifs. Il persiste certainement des biais expérimentaux que nous ne discuterons pas ici (voir Dai *et al.* (2013) et Dbouk *et al.* (2013)) mais l'on remarquera seulement que les mesures s'avèrent globalement plus proches des simulations avec frottement. Toutefois, le calcul prédit toujours un N_1 qui reste négatif et ne peut de ce fait pas expliquer les résultats de Couturier *et al.* (2011) ou de Dbouk *et al.* (2013) où N_1 est quasi-nul ou positif. Le frottement explique donc en partie – mais pas totalement – les valeurs expérimentales faibles de $|N_1|$; un chapitre ultérieur consacré au confinement reviendra sur cet aspect.

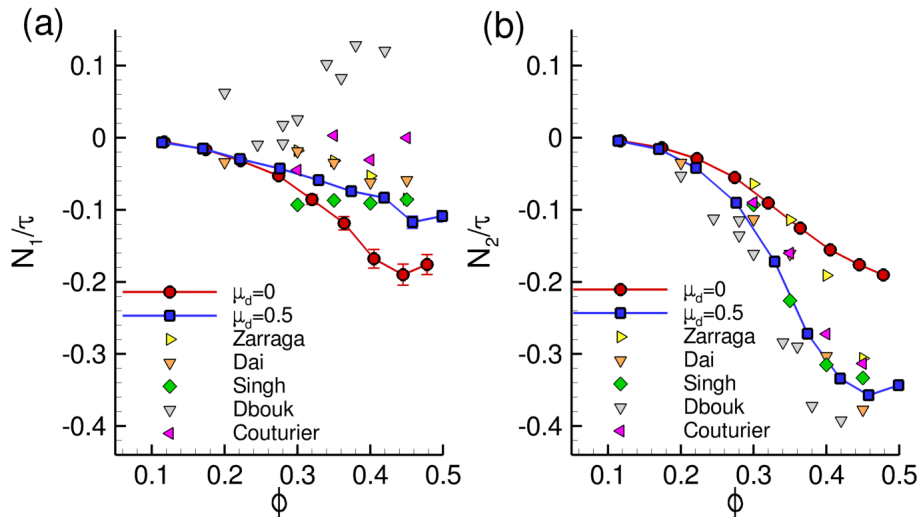


Fig. 9.5 – Différences de contraintes normales N_1/τ (a) et N_2/τ (b) en fonction de la fraction volumique pour $\mu_d=0$ et 0,5 et comparaisons avec les mesures (Couturier *et al.*, 2011; Dai *et al.*, 2013; Dbouk *et al.*, 2013; Singh et Nott, 2000; Zarraga *et al.*, 2000). La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

Afin de mieux comprendre ces résultats, la Fig. 9.6 présente la décomposition en partie hydro-

dynamique et contact des différences de contraintes normales adimensionnées N_1/τ (a) et N_2/τ (b) pour des particules non-frottantes ($\mu_d=0$) et frottantes ($\mu_d=0,5$).

Pour la première différence, en Fig. 9.6(a), la contribution hydrodynamique est indépendante du frottement tandis que la contribution du contact est moins négative dans le cas frottant. La diminution de $|N_1|$ avec le frottement semble ainsi en grande partie liée à la réduction de la contribution du contact. Ce rôle prédominant du frottement sur la composante de contact est similaire à celui déjà observé précédemment pour la viscosité. Pour des fractions volumiques modérées, la contrainte hydrodynamique représente la partie majoritaire de N_1 tandis que pour les régimes plus denses, contraintes hydrodynamique et de contact contribuent de manière similaire.

Pour la seconde différence, en Fig. 9.6(b), des conclusions similaires s'imposent, à savoir que le frottement joue un faible rôle sur la partie hydrodynamique alors qu'il affecte de manière marquée la contribution du contact. La Fig. 9.6(b) montre clairement que la partie hydrodynamique de N_2 reste toujours faible. Ceci signifie que les deux différences de contraintes normales n'ont pas la même origine physique : pour N_1 , il s'agit principalement de l'hydrodynamique – au moins pour les fractions faibles à modérées – alors que N_2 provient entièrement du contact. Cela n'est pas étonnant outre mesure puisque les contacts se font principalement dans le plan de cisaillement et dans le quadrant de compression, soit $|\Sigma_{zz}^c| \ll |\Sigma_{yy}^c| \approx |\Sigma_{xx}^c|$.

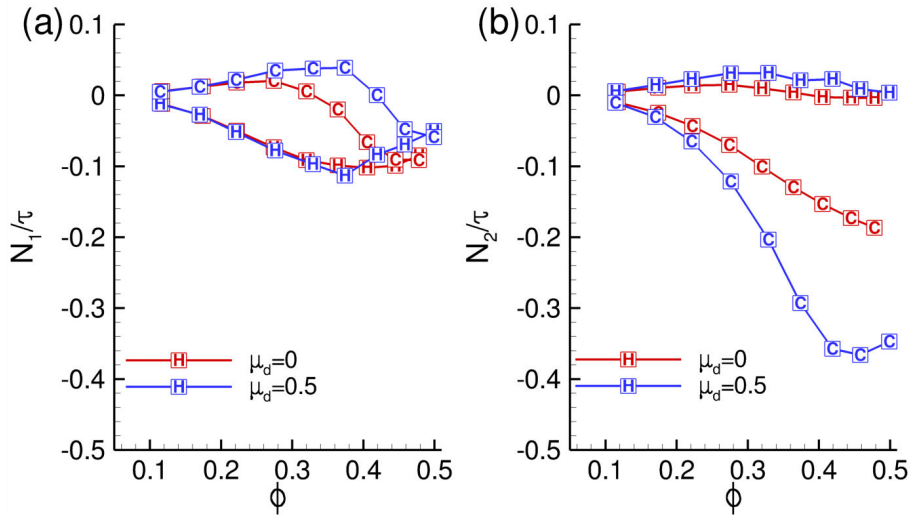


Fig. 9.6 – Contribution hydrodynamique ("H") et de contact ("C") aux différences de contraintes normales N_1/τ (a) et N_2/τ (b) en fonction de la fraction volumique pour $\mu_d=0$ (en rouge) et $\mu_d=0,5$ (en bleu). La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

Dans les différents résultats qui viennent d'être présentés, il semble se dessiner un changement de comportement pour une fraction volumique de l'ordre de 0,4 à 0,45. Cette valeur marque le début d'un écart marqué entre η^h et η_∞^r ainsi qu'une modification dans l'évolution de N_1 et N_2 , principalement aux μ_d élevés. Ce changement se matérialise nettement par un maximum du rapport N_2/N_1 dans ces cas. Expérimentalement, les expériences de Blanc (2011) montrent également une modification forte de la microstructure à cette fraction volumique. Il est possible que celle-ci délimite un régime dense au comportement différent, peut-être du fait d'une prédominance des forces de contact. Notons que ce changement ne semble pas imputable à l'effet des parois. Il serait nécessaire d'étudier plus en détail ces régimes très concentrés.

9.4 Contraintes normales

La section précédente était consacrée aux différences de contraintes normales, ce qui se justifie par leur rôle central en rhéologie. D'un point de vue plus fondamental et à des fins de compréhension, il est également utile de considérer les contraintes normales individuellement, et non plus leur différence. Qui plus est, il n'existe que peu de données expérimentales sur ces contraintes normales (Boyer *et al.*, 2011; Couturier *et al.*, 2011; Dbouk *et al.*, 2013; Garland *et al.*, 2012; Zarraga *et al.*, 2000). Cette partie étudie le rôle du frottement sur les contraintes normales ; des comparaisons avec des données expérimentales seront fournies dans des sections ultérieures (§9.7 et §9.8).

La Fig. 9.7 présente les résultats obtenus sur les contraintes normales Σ_{ii}^p ainsi que la pression particulaire Π pour des particules non-frottantes ($\mu_d=0$) et frottantes avec $\mu_d=0,5$. Toutes ces grandeurs sont encore une fois adimensionnées par la contrainte de cisaillement τ . Il apparaît que le rôle du frottement est similaire pour toutes les contraintes normales, à savoir une augmentation substantielle pour $\phi \gtrsim 0,3$. L'effet semble cependant plus marqué pour les contraintes Σ_{xx}^p et Σ_{yy}^p . Le frottement conduit également à un doublement de Π/τ , ce qui correspond globalement à un triplement de Π . De même, nous verrons un peu plus tard (en §9.7) que la pression particulaire de contact Π^c augmente de manière importante du fait du frottement. Puisque $\Pi^c \propto \langle \mathbf{F}^c \cdot \mathbf{r} \rangle$ est une mesure de la force normale entre particules, ceci signifie que le frottement (forces tangentielles entre particules) conduit à des niveaux de force normale plus importants dans une suspension.

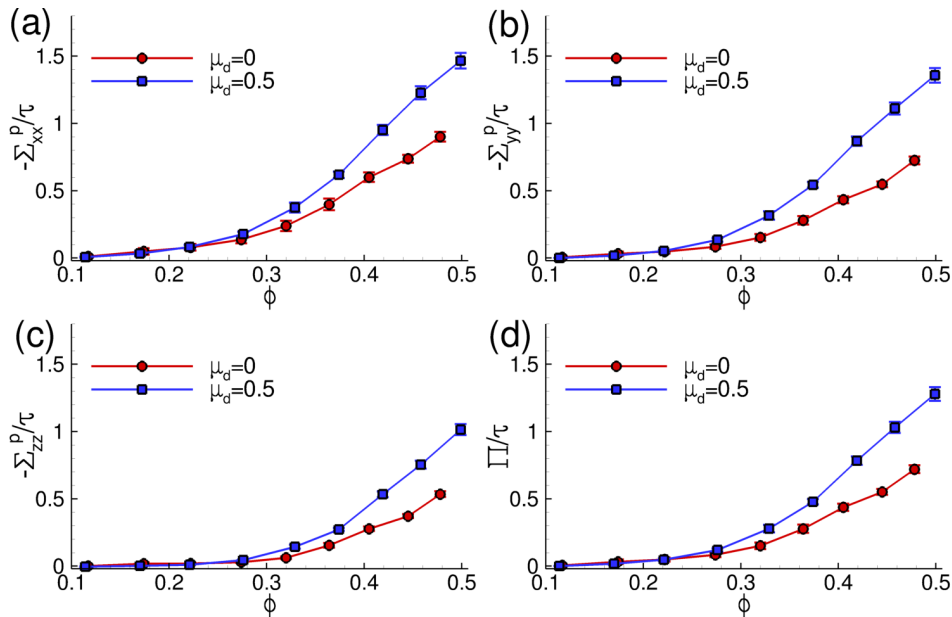


Fig. 9.7 – Contraintes normales $-\Sigma_{xx}^p/\tau$ (a) ; $-\Sigma_{yy}^p/\tau$ (b) ; $-\Sigma_{zz}^p/\tau$ (c) et pression particulaire Π/τ (d) en fonction de la fraction volumique pour des coefficients de frottement $\mu_d=0$ (en rouge) et $\mu_d=0,5$ (en bleu). La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

9.5 Microstructure

La fonction de corrélation de paire $g(\mathbf{r})$ est tracée en Fig. 9.9 en fonction de l'angle θ , pour $\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$, à la fraction volumique $\phi_{bulk}=0,4$. L'angle θ est compté positif à partir de la direction de la vitesse (voir schéma Fig. 9.8). Les deux distributions présentées sont calculées dans le plan de cisaillement, pour $r < 2,1a$ (Fig. 9.9(a)) et pour $r < 2a + h_{rug}$ (Fig. 9.9(b)). Dans ce dernier cas, il s'agit de la corrélation g_c au contact. Ces microstructures sont obtenues dans la zone de cœur \mathcal{D}_{core} . Par symétrie, seul l'intervalle $0 < \theta < \pi$ est représenté.

Les deux distributions possèdent une forme asymétrique avec une forte probabilité de trouver des particules dans la zone de compression ($\pi - \theta < \pi/2$) et une zone de déplétion marquée autour de l'axe d'extension $\pi - \theta \approx 3\pi/4$. Cette dernière est particulièrement apparente pour les particules au contact en Fig. 9.9(b). L'asymétrie amont-aval mise en évidence ici est connue pour être en partie responsable du comportement non-newtonien des suspensions concentrées et a pu être observée expérimentalement (Blanc *et al.*, 2011; Parsi et Gadala-Maria, 1987). Nos résultats en Fig. 9.9(a) montrent un excellent accord avec les simulations FCM de Yeo et Maxey (2010b) pour des particules non-frottantes (cet article ne fournit pas la distribution au contact d'où l'absence de comparaison en Fig. 9.9(b)).

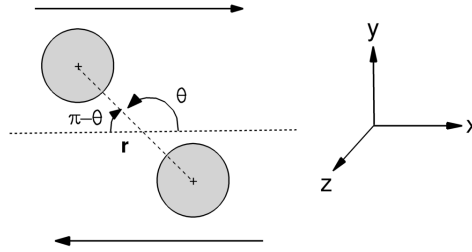


Fig. 9.8 – Définition de l'angle θ pour deux particules en cisaillement

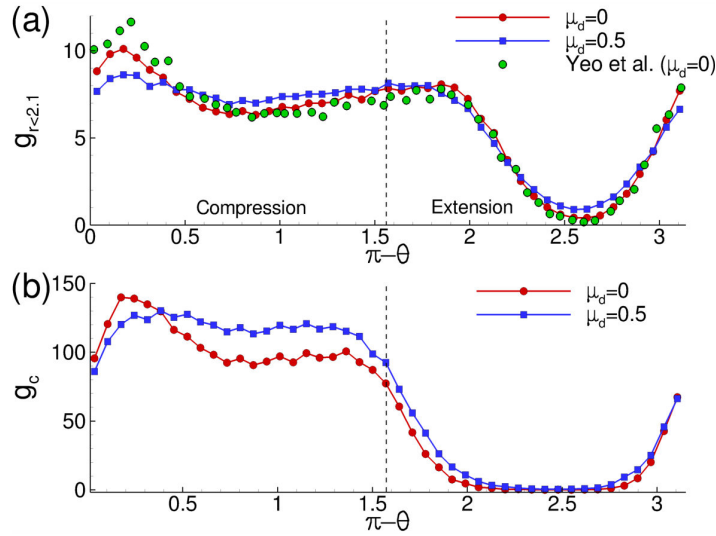


Fig. 9.9 – Dépendance angulaire de la fonction de corrélation de paire $g(\theta)$ pour $\phi_{bulk}=0,4$ et $\mu_d=0$ (en rouge) ; $\mu_d=0,5$ (en bleu). La fonction $g(\theta)$ est calculée pour $r/a < 2,1$ (a) et au contact $r/a < 2+\xi_{rug}$ (b). La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$. Des résultats de simulation de Yeo et Maxey (2010b) sont également présentés.

L'effet du frottement sur la microstructure est sensible, particulièrement dans la zone de compression et pour les particules au contact. Le frottement induit une baisse de la densité de particules dans la direction de la vitesse $\pi - \theta \approx 0$ mais une augmentation dans la région $\pi/4 < \pi - \theta < \pi/2$. Ceci correspond à une moindre densité de force normale donnant lieu à un N_1 négatif et, au contraire, à une plus grande densité de force normale donnant lieu à un N_1 positif, d'où une valeur de N_1 globalement moins négative avec le frottement. L'effet est opposé pour N_2 . Globalement, cette redistribution angulaire opérée par le frottement conduit à un profil de $g(\theta)$ relativement plat dans la zone de compression, ce qui est cohérent avec les faibles valeurs de N_1^c notées en Fig. 9.6(a). Cet effet du frottement sur la microstructure est qualitativement en accord avec les simulations de Sierou et

Brady (2002).

9.6 Coefficient de frottement

Nous évaluons dans cette partie la dépendance des grandeurs rhéologiques au coefficient de frottement μ_d pour une suspension à $\phi_{bulk}=0,4$. Les résultats sont présentés en Fig. 9.10 pour la viscosité relative et les différences de contraintes normales.

La viscosité relative η_r augmente de manière monotone avec le coefficient de frottement bien qu'une inflexion soit notée vers $\mu_d \approx 0,5$. Au contraire, les différences de contraintes normales N_1/τ et N_2/τ varient de façon importante pour les faibles coefficients de frottement mais saturent vers $\mu_d \approx 0,5$. En conséquence, le rapport N_2/N_1 évolue assez fortement pour les μ_d faibles mais devient constant et indépendant de μ_d pour $\mu_d \gtrsim 0,5$. Soulignons que même dans ce régime, N_1 et N_2 continuent d'augmenter – bien que faiblement – puisque $\tau = \eta_r \eta \dot{\gamma}$ augmente avec μ_d .

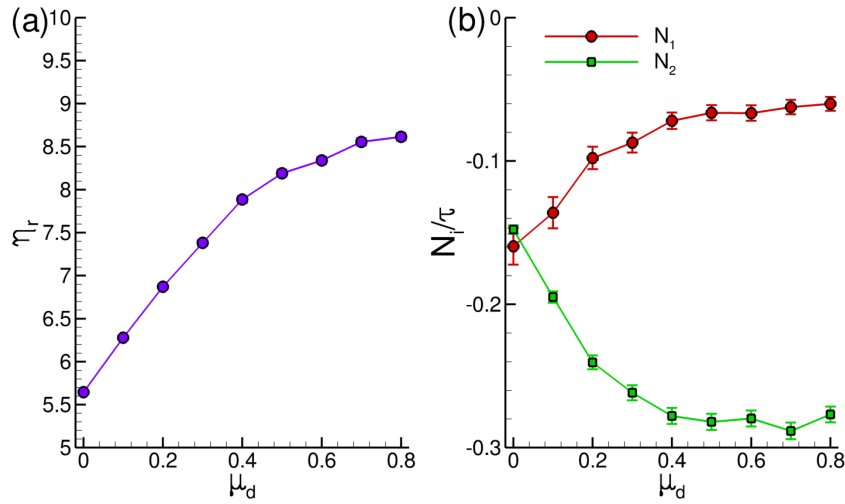


Fig. 9.10 – Viscosité relative η_r (a) et différences de contraintes normales N_1/τ et N_2/τ (b) en fonction de μ_d . Les simulations sont réalisées à $\phi_{bulk}=0,4$ et la rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

La Fig. 9.11(a) montre clairement que les contraintes normales Σ_{ii}^p sont relativement affectées par le frottement, en tout cas plus que ne l'est la contrainte de cisaillement τ puisque le rapport $|\Sigma_{ii}^p|/\tau$ croît continûment avec μ_d . Ce rapport double typiquement pour μ_d entre 0 et 0,8. La Fig. 9.11(b) présente quant à elle la contribution du contact Σ_{ii}^c à la contrainte particulaire Σ_{ii}^p . Il apparaît que les contraintes de contact Σ_{xx}^c et Σ_{yy}^c tendent vers la même valeur à mesure que le coefficient de frottement croît et l'on a $\Sigma_{xx}^c \approx \Sigma_{yy}^c$ pour $\mu_d \gtrsim 0,4$. En conséquence, $N_1^c \rightarrow 0$ quand le frottement augmente, ce qui conduit à $N_1/\tau = N_1^h/\tau + N_1^c/\tau \approx N_1^h/\tau$ qui devient donc indépendant de μ_d comme noté précédemment en Fig. 9.10(b) (rappelons en effet que N_1^h/τ et N_2^h/τ ne sont pas affectés par le frottement, voir les résultats de la Fig. 9.6(a)). La Fig. 9.11(b) montre également que les contraintes normales Σ_{ii}^c/τ atteignent une valeur limite pour un frottement important. Ceci implique que $N_2^c/\tau = (\Sigma_{yy}^c - \Sigma_{zz}^c)/\tau$ ne dépend plus du coefficient de frottement et que, de ce fait, $N_2/\tau = N_2^h/\tau + N_2^c/\tau$ non plus.

Cette séparation entre hydrodynamique et contact permet de révéler plus clairement le rôle prépondérant du contact dans les suspensions concentrées. Les résultats de la Fig. 9.11 peuvent être exploités pour évaluer cette contribution relative du contact et nous trouvons par exemple pour $\phi_{bulk}=0,4$ et $\mu_d=0,5$, les valeurs suivantes : $\Sigma_{xx}^c/\Sigma_{xx}^p \approx 0,83$; $\Sigma_{yy}^c/\Sigma_{yy}^p \approx 0,91$ et $\Sigma_{zz}^c/\Sigma_{zz}^p \approx 0,82$. Ce qui signifie dans ce cas précis que les contacts sont responsables d'environ 80% à 90 % de la contrainte

totale. Ce rôle majeur du contact dans les suspensions denses sera également confirmé dans les parties suivantes.

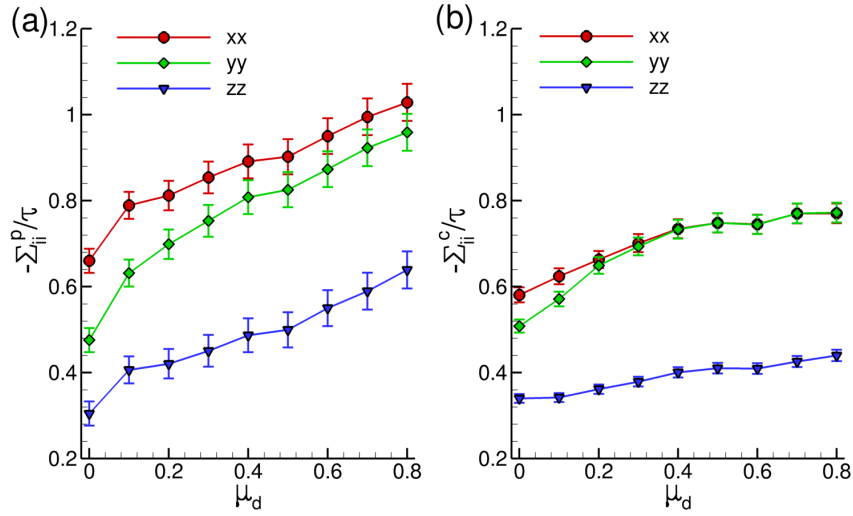


Fig. 9.11 – Contraintes normales $-\Sigma_{ii}^p/\tau$ (a) et contraintes normales de contact $-\Sigma_{ii}^c/\tau$ (b) en fonction de μ_d pour $\phi_{bulk}=0,4$. La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

Ces résultats montrent que les différences de contraintes normales sont particulièrement sensibles au frottement, surtout pour $\mu_d \lesssim 0,5$ qui est la gamme typique des coefficients de frottement des matériaux usuels. De ce fait, le frottement pourrait être à l'origine de certains écarts entre expériences puisque les particules utilisées ne sont pas toujours de même nature et possèdent donc des coefficients de frottement différents. De plus, le coefficient de frottement dynamique μ_d dépend d'un certain nombre de paramètres comme le niveau de force normale, la vitesse de glissement, la rugosité, la température, etc. (Yamaguchi, 1994), ce qui pourrait ajouter encore aux incertitudes.

Les comparaisons à venir avec les données expérimentales vont montrer que le choix $\mu_d \approx 0,5$ semble fournir la meilleure corrélation. Ceci est cohérent avec la valeur recensée sur le polystyrène ou le PMMA – deux matériaux largement employés dans les études expérimentales – respectivement de 0,47 et 0,55 (Yamaguchi, 1994). Les coefficients typiquement utilisés en simulation des milieux granulaires sont également dans cette gamme, généralement de 0,3 à 0,5 (Radjaï et Dubois, 2010).

9.7 Lien vers les modèles continus

Au tout début de la partie numérique de ce manuscrit, nous avons dressé un aperçu des méthodes de simulation et souligné que, bien qu'extrêmement précieuses, les méthodes résolues à l'échelle de la particule – celles-là même que nous utilisons en ce moment – s'avèrent beaucoup trop coûteuses en temps calcul pour être utilisées dans des configurations industrielles. Il est nécessaire dans ce cas de recourir à des modèles continus où la suspension est assimilée à un fluide homogène possédant des lois constitutives spécifiques. Nous avons par exemple déjà évoqué le SBM ("*Suspension Balance Model*") de Morris et Boulay (1999). Dans ce modèle, le tenseur des contraintes particulières Σ^p est modélisé par

$$\Sigma^p = -\eta\dot{\gamma}\mathbf{Q} + 2\eta\eta_r\mathbf{E} \quad (9.1)$$

avec

$$\mathbf{Q} = \eta_n^p \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^p & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^p \end{bmatrix} \quad (9.2)$$

où η_n^p est la viscosité normale et λ_2^p et λ_3^p sont des paramètres d'anisotropie $\lambda_2^p = \Sigma_{yy}^p / \Sigma_{xx}^p$ et $\lambda_3^p = \Sigma_{zz}^p / \Sigma_{xx}^p$. L'exposant p est là pour rappeler que ces paramètres sont calculés à partir du tenseur particulaire Σ^p .

Du fait de l'absence de données expérimentales, Morris et Boulay (1999) proposent des coefficients d'anisotropie constants $\lambda_2^p \approx 0,8$ et $\lambda_3^p \approx 0,5$. Le SBM repose sur l'idée que le comportement global de la suspension est contrôlé par la contrainte particulaire Σ^p . Cependant, cette hypothèse est actuellement controversée et la nature exacte du tenseur des contraintes à introduire dans le modèle reste incertaine. En particulier, Lhuillier (2009) et Nott *et al.* (2011) ont montré qu'il serait théoriquement nécessaire de considérer un tenseur s'apparentant plutôt à la contribution du contact à la contrainte particulaire, à savoir Σ^c , plutôt que Σ^p . Cette possible faille théorique dans le SBM n'a en fait que peu de conséquences sur les capacités prédictives du modèle et ce, pour deux raisons. La première tient au fait que les paramètres d'anisotropie sont choisis par Morris et Boulay (1999) de manière à retrouver certains résultats expérimentaux de migration. Du coup, leur origine physique exacte est de peu d'importance pour les prédictions du modèle. La seconde est que – comme nous l'avons montré – la contrainte de contact est la contrainte prédominante dans les suspensions concentrées et que l'hypothèse $\Sigma^p \approx \Sigma^c$ est relativement correcte.

Dans cette partie, nous exploitons nos résultats de simulation pour étudier les paramètres du SBM, à savoir la viscosité normale et les paramètres d'anisotropie. Le but reste toujours d'étudier le rôle du frottement sur ces grandeurs mais aussi de contribuer à analyser si le choix de la contrainte de contact dans le modèle est plus pertinent que la contrainte particulaire. Les mesures expérimentales directes des paramètres du SBM sont très peu nombreuses (Dbouk *et al.*, 2013; Zarraga *et al.*, 2000) car il est nécessaire de caractériser simultanément les trois composante normales du tenseur de contrainte. De surcroît, il n'existe pas d'arguments théoriques solides pour déterminer si les expériences mesurent effectivement Σ^p – comme on le suppose généralement – ou la contribution du contact Σ^c ou encore un autre tenseur.

Les résultats obtenus pour les paramètres d'anisotropie $\lambda_2^p = \Sigma_{yy}^p / \Sigma_{xx}^p$ et $\lambda_3^p = \Sigma_{zz}^p / \Sigma_{xx}^p$ sont présentés en Fig. 9.12 pour des particules non-frottantes ($\mu_d=0$) et frottantes ($\mu_d=0,5$). Pour les particules non-frottantes, nos simulations sont proches de celles de Yeo et Maxey (2010b) avec une évolution linéaire modérée de ces paramètres. Le frottement a ici un effet assez modeste et ne contribue qu'à une légère augmentation de λ_2^p et λ_3^p . Les valeurs obtenues restent dans tous les cas proches de celles utilisées dans le SBM. Cependant, les calculs suggèrent que les λ_i^p ne sont pas constants et qu'il existe une dépendance en ϕ .

Du point de vue expérimental, le paramètre λ_2^p augmente linéairement avec ϕ mais avec des valeurs sensiblement supérieures à celles prédites. Au contraire, les λ_3^p mesurés sont quasiment constants autour de 0,5 qui est la valeur introduite par Morris et Boulay (1999) dans leur modèle pour expliquer l'absence de migration en écoulement torsionnel.

La Fig. 9.13 présente des résultats similaires mais pour les paramètres d'anisotropie de contact, définis par $\lambda_2^c = \Sigma_{yy}^c / \Sigma_{xx}^c$ et $\lambda_3^c = \Sigma_{zz}^c / \Sigma_{xx}^c$. Ces paramètres – qui n'existent pas dans le modèle original – sont censés remplacer les λ_i^p usuels dans l'éventualité où la contrainte de contact devrait être utilisée en lieu et place de la contrainte particulaire dans le SBM. Sur cette figure sont également ajoutés les points expérimentaux de Dbouk *et al.* (2013). Ce sont les mêmes que ceux déjà présentés en Fig. 9.12 dans la mesure où il n'est pas clair s'ils représentent plutôt Σ^p ou Σ^c .

Il est intéressant de constater que l'accord entre λ_i^c simulés et mesurés est largement amélioré. Il y a en particulier une très bonne corrélation pour λ_3^c qui est trouvé relativement constant et proche de 0,5 pour toutes les fractions volumiques. La valeur de λ_2^c est également plus proche des expériences même si l'évolution semble différente puisque les λ_2^c calculés diminuent avec ϕ . Comme pour les λ_i^p , l'effet du frottement sur les λ_i^c est faible et les valeurs restent proches de celles choisies par Morris

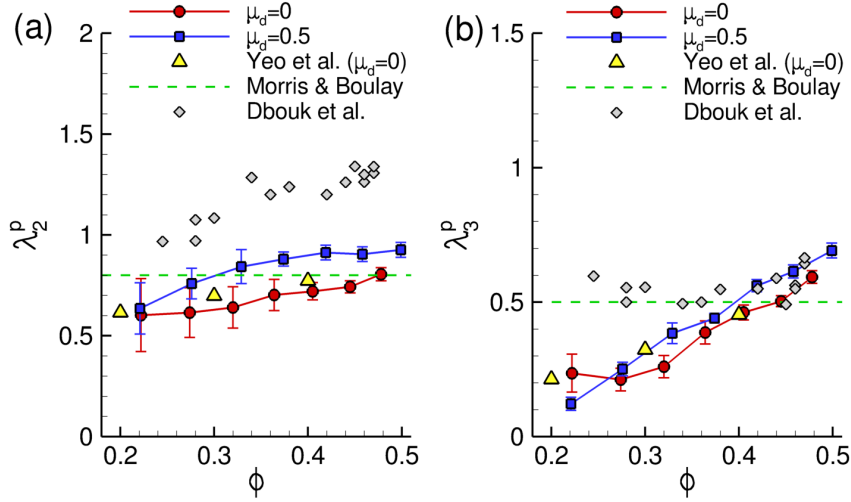


Fig. 9.12 – Paramètres d'anisotropie λ_2^p (a) et λ_3^p (b) en fonction de la fraction volumique pour $\mu_d=0$ et $\mu_d=0.5$. La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$. Sont également présentées des simulations de Yeo et Maxey (2010b) ($\mu_d=0$) et des mesures de Dbouk et al. (2013). Les lignes en pointillés représentent les valeurs utilisées dans le SBM de Morris et Boulay (1999).

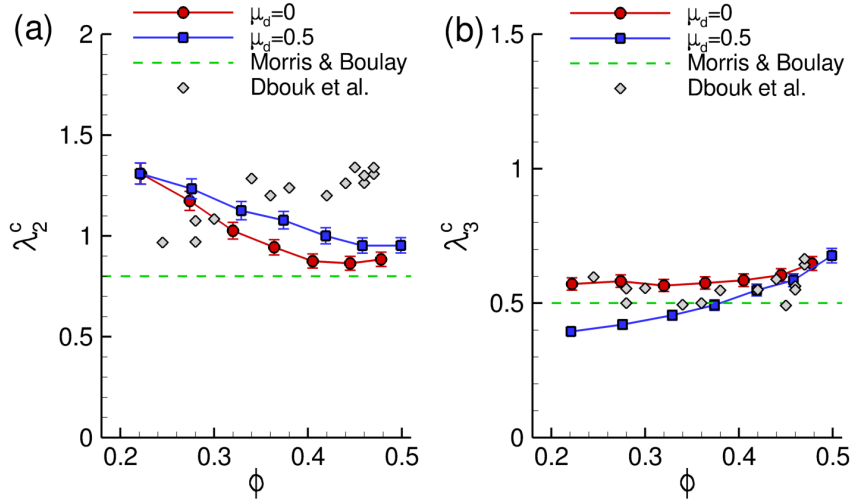


Fig. 9.13 – Paramètres d'anisotropie de contact λ_2^c (a) et λ_3^c (b) en fonction de la fraction volumique pour les coefficients de frottement $\mu_d=0$ et $\mu_d=0.5$. La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$. Sont également présentées des mesures de Dbouk et al. (2013) (les mêmes qu'en Fig. 9.12). Les lignes en pointillés représentent les valeurs utilisées dans le SBM de Morris et Boulay (1999).

et Boulay (1999) dans leur modèle. Le fait que les paramètres λ_i^c soient en bien meilleur accord avec les expériences que les λ_i^p est troublant. Toutefois, ce résultat seul n'est pas suffisant pour conclure sur le fait que les expériences mesurent la contrainte particulaire de contact plutôt que la contrainte particulaire totale.

La viscosité normale η_n^p et la viscosité normale de contact η_n^c obtenues par simulation sont présentées en Fig. 9.14 avec des mesures de Dbouk et al. (2013). Ces données expérimentales sont dupliquées sur les deux figures Fig. 9.14(a) et Fig. 9.14(b) du fait de l'incertitude récurrente sur leur signification physique. Des résultats de simulation de la littérature (Yeo et Maxey, 2010b) sont également proposés (disponibles uniquement pour η_n^p et sans frottement), résultats avec lesquels nos calculs s'accordent bien.

Contrairement aux paramètres d'anisotropie, les viscosités normales η_n^p et η_n^c augmentent forte-

ment avec le frottement, comme cela était déjà le cas pour la viscosité relative de cisaillement η_r . Seule la prise en compte du frottement ($\mu_d=0,5$) dans les simulations permet de retrouver un bon accord avec les mesures, que ce soit pour la viscosité normale η_n^p ou la viscosité normale de contact η_n^c . Il s'agit encore une fois d'une preuve supplémentaire du rôle important que revêt le frottement dans les suspensions concentrées.

Le rapport η_n^c/η_n^p peut être évalué à partir de ces résultats et l'on trouve que ce dernier est relativement constant pour $\phi \gtrsim 0,3$ avec $\eta_n^c/\eta_n^p \approx 0,8$, valeur qui n'est d'ailleurs que peu modifiée par le frottement. Ceci confirme encore une fois que la contrainte de contact semble prédominer dans les suspensions denses.

Morris et Boulay (1999) proposent une corrélation empirique pour la viscosité normale qui est donnée par

$$\eta_n^p = K_n \left(\frac{\phi/\phi_m}{1 - \phi/\phi_m} \right)^2 \quad (9.3)$$

avec $K_n=0,75$ et $\phi_m=0,68$. Pour des questions de clarté, nous n'avons pas tracé cette courbe sur la Fig. 9.14, mais si tel avait été le cas, cette loi aurait été très proche des résultats de simulation pour des particules non-frottantes, c'est-à-dire une sous-estimation forte de la viscosité expérimentale. Un fit de η_n^p pour nos résultats frottants ($\mu_d=0,5$) fournit plutôt $K_n=1,69$ et $\phi_m=0,61$.

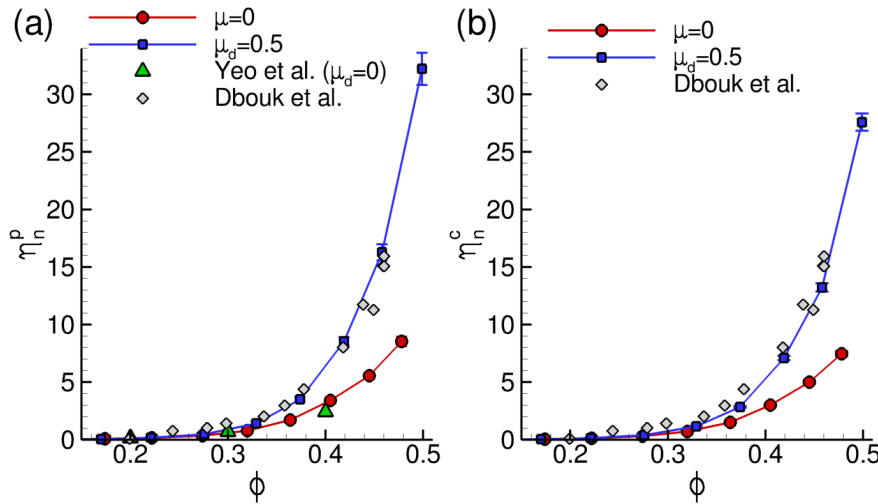


Fig. 9.14 – Viscosité normale η_n^p (a) et viscosité normale de contact η_n^c (b) en fonction de la fraction volumique pour $\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$. La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$. Des simulations de Yeo et Maxey (2010b) ($\mu_d=0$) sont ajoutées en (a). Les points expérimentaux de Dbouk et al. (2013) sont identiques en (a) et en (b).

La pression particulaire de contact peut être exprimée en fonction de η_n^c par

$$\Pi^c = \eta_n^c \dot{\gamma} \frac{1 + \lambda_2^c + \lambda_3^c}{3} \quad (9.4)$$

d'où $\Pi^c \propto \eta_n^c$. Il est apparent d'après Fig. 9.14(b) que Π^c croît nettement avec le frottement, d'un facteur 2 entre $\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$ à $\phi=0,4$. Comme nous l'avons souligné auparavant en §9.4, cette augmentation de Π^c traduit une élévation du niveau de force normale exercée sur les particules.

9.8 Rhéologie globale

Dans une étude récente, Boyer et al. (2011) ont cherché à unifier la rhéologie des suspensions et des granulaires. Leurs travaux ont montré que les suspensions denses confinées ont un comporte-

ment global viscoplastique semblable aux milieux granulaires et que leur rhéologie est décrite par un unique paramètre I_v . Ce nombre visqueux s'écrit $I_v = \eta\dot{\gamma}/P_p$ où P_p est une pression de confinement. Ce paramètre I_v peut être vu comme le rapport entre un temps caractéristique de cisaillement $\dot{\gamma}^{-1}$ et un temps caractéristique visqueux η/P_p . Il est analogue au nombre inertiel I utilisé dans les granulaires secs $I = a\dot{\gamma}\sqrt{\rho_p/P_p}$. En utilisant une cellule de mesure à pression imposée, Boyer *et al.* (2011) montrent que le coefficient de frottement effectif μ et que la fraction volumique ϕ sont contrôlés uniquement par I_v , soit $\mu = \mu(I_v)$ et $\phi = \phi(I_v)$ et ce, quelle que soit la pression de confinement. Dans leur travail, seules des suspensions très denses ($\phi \gtrsim 0,45$) – et donc de très petits nombres visqueux I_v – sont étudiées.

Cette section est dédiée à la comparaison de nos simulations avec les résultats expérimentaux de Boyer *et al.* (2011). Dans l'expérience, la pression de confinement P_p est imposée en appliquant une force normale à la suspension via une plaque poreuse. Afin de s'approcher au mieux de cette configuration, il semble légitime d'identifier la pression de confinement expérimentale à la contrainte normale Σ_{yy}^p . Plus précisément, nous avons considéré Σ_{yy}^p et Σ_{yy}^c et trouvons un meilleur accord avec les résultats expérimentaux en choisissant $P_p = \Sigma_{yy}^c$. Ceci peut représenter un élément supplémentaire allant dans le sens d'une caractérisation de la contrainte de contact par les expériences. Ainsi, en définissant $I_v = \eta\dot{\gamma}/\Sigma_{yy}^c$ dans les simulations, nos résultats de calcul s'avèrent globalement suivre une courbe unique $\phi = \phi(I_v)$, comme attendu d'après Boyer *et al.* (2011). Evidemment, pour les régimes denses, nous avons $\Sigma_{yy}^p \approx \Sigma_{yy}^c$ et la considération de Σ_{yy}^c à la place de Σ_{yy}^p n'apporte que peu d'améliorations.

La Fig. 9.15 montre nos résultats en termes de $\phi(I_v)$. La courbe noire est celle proposée par Boyer *et al.* (2011) pour fitter leurs résultats expérimentaux :

$$\phi = \frac{\phi_m}{1 + I_v^n} \quad (9.5)$$

avec $\phi_m=0,585$ et $n=0,5$. La courbe verte en pointillés est un fit de Eq. (9.5) sur nos calculs et fournit plutôt $\phi_m \approx 0,64$ et $n \approx 0,4$. Les points de simulation présentés compilent en fait l'ensemble de nos différents résultats en termes de fractions volumiques, rugosités, coefficients de frottement, raideurs, etc. et seul l'aspect frottant/non-frottant a été identifié sur le graphique par un code couleur différent.

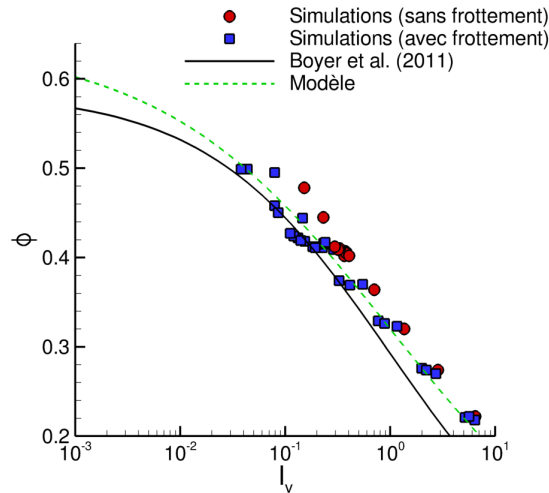


Fig. 9.15 – Fraction volumique ϕ en fonction de I_v pour des simulations avec des particules non-frottantes (rouge) et frottantes (en bleu). La ligne noire représente un ajustement des résultats expérimentaux de Boyer, soit Eq. (9.5) avec $\phi_m=0,585$ et $n=0,5$. La ligne verte en pointillés est une régression des simulations, soit Eq. (9.5) avec $\phi_m=0,64$ et $n=0,4$.

Les résultats de calcul se superposent approximativement sur une unique courbe maîtresse, ce

qui confirme la loi proposée par Boyer *et al.* (2011). Pour les régimes dilués cependant, il existe un écart entre nos calculs et les mesures, écart qui augmente avec I_v . Rappelons que ces résultats expérimentaux sont obtenus dans le cadre de suspensions assez denses avec I_v dans la gamme $10^{-6} \sim 10^{-1}$ alors que nos simulations sont cantonnées à des nombres visqueux beaucoup plus grands $10^{-1} \sim 10^1$. Il est donc légitime de questionner la validité de la loi expérimentale aux très grands I_v . Les résultats de calcul montrent que Eq. (9.5) reste valide mais avec des paramètres légèrement ajustés en régime plus dilué avec $\phi_m \approx 0,64$ et $n \approx 0,4$. La relation Eq. (9.5) est obtenue de manière semi-empirique en considérant la divergence de la viscosité près de la fraction volumique maximale et il est possible que les suspensions très diluées ne puissent être correctement modélisées par des lois obtenues à travers le comportement près du blocage. Le fait que notre régression fournisse $\phi_m \approx 0,64$, qui est la valeur ϕ_{rcp} de l'arrangement aléatoire le plus compact, est probablement fortuit.

La seconde loi constitutive s'applique au coefficient de frottement effectif μ (à ne pas confondre avec le coefficient de frottement dynamique μ_d du matériau) et défini par

$$\mu = \tau / P_p \quad (9.6)$$

avec τ la contrainte de cisaillement $\tau = \eta_r \eta \dot{\gamma}$. Ici encore, la pression P_p sera assimilée dans nos simulations à la contrainte Σ_{yy}^c . Boyer *et al.* (2011) proposent de modéliser la loi de frottement par la somme d'une contribution hydrodynamique μ^h et d'une contribution de contact μ^c par

$$\mu(I_v) = \underbrace{\mu_1 + \frac{\mu_2 - \mu_1}{1 + I_0/I_v}}_{\mu^c} + \underbrace{I_v + \frac{5}{2} \phi_m I_v^{1/2}}_{\mu^h} \quad (9.7)$$

Les valeurs $\mu_1=0,32$; $\mu_2=0,7$ et $I_0=0,005$ sont issues de résultats en milieu granulaire.

La Fig. 9.16 présente de la même manière que précédemment le coefficient de frottement effectif $\mu(I_v)$. Les résultats de simulation se regroupent encore autour d'une courbe unique et ce, malgré la diversité des configurations en termes de rugosité ou de coefficient de frottement par exemple. Comme pour $\phi(I_v)$, l'accord avec la loi expérimentale de Boyer (courbe noire) est plutôt bon malgré cet écart récurrent constaté aux grands I_v . Encore une fois, il est possible que celui-ci provienne de l'extrapolation de la loi expérimentale en régime dilué. La courbe verte en pointillés est une proposition d'un modèle qui sera décrit un peu plus loin.

Dans le but d'étudier cette loi de frottement dans les régimes dilués, nous avons analysé séparément la contribution hydrodynamique et de contact, respectivement définie par

$$\mu^h = \frac{\eta^h \eta \dot{\gamma}}{\Sigma_{yy}^c} \quad (9.8)$$

$$\mu^c = \frac{\eta^c \eta \dot{\gamma}}{\Sigma_{yy}^c} \quad (9.9)$$

Ce découpage est naturel du point de vue simulation mais reste très difficile expérimentalement. Ces deux contributions prises séparément peuvent ainsi être comparées aux expressions de μ^h et μ^c proposées dans Eq. (9.7).

Les résultats de simulation sont présentés en Fig. 9.17(a) et Fig. 9.17(b) pour la partie hydrodynamique et la partie contact. Il apparaît d'après la Fig. 9.17(b) que la contribution de contact μ^c est en bon accord avec le modèle Eq. (9.7). Notons que comme les I_v explorés restent grands (en particulier, $I_v \gg I_0$), Eq. (9.7) se simplifie en $\mu^c \approx \mu_2=0,7$. Cette bonne corrélation est intéressante car la valeur de μ_2 est issue d'expériences en milieux granulaires. Ceci signifie que la contribution de contact dans un granulaire ou une suspension diluée reste similaire. Le coefficient de frottement effectif de contact μ^c s'avère peu sensible au coefficient de frottement des particules μ_d – les particules frottantes ne

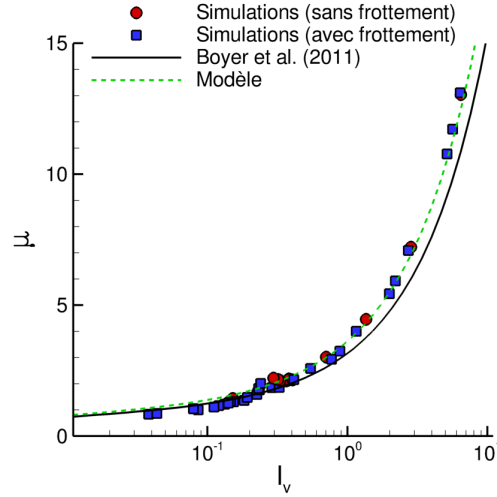


Fig. 9.16 – Coefficient de frottement effectif $\mu = \tau / \Sigma_{yy}^c$ fonction de I_v pour des simulations avec des particules non-frottantes (rouge) et frottantes (en bleu). La ligne noire représente un ajustement des résultats expérimentaux de Boyer, soit Eq. (9.7) avec $\phi_m=0,585$. La ligne verte en pointillés est le modèle Eq. (9.12) avec $\phi_m=0,64$ et $n=0,4$.

donnant que $\mu_2 \approx 0,8$ – en tout cas pour ces valeurs fortes de I_v . Même à $\phi_{bulk}=0,5$, le régime n'est pas encore assez dense pour pouvoir proposer un modèle plus fin de μ^c sur toute la gamme de I_v et seule la valeur haute μ_2 peut être déduite des simulations présentes.

Pour des suspensions diluées ou semi-diluées, la contribution la plus importante provient de l'hydrodynamique comme l'indique clairement la Fig. 9.17(a) (noter la différence d'échelle avec Fig. 9.17(b)). En fait, le modèle Eq. (9.7) prédit l'égalité $\mu^c = \mu^h$ pour $I_v \approx 10^{-1}$, soit $\phi \approx 0,45$. Ainsi, pour les systèmes dilués, il est primordial d'améliorer la modélisation de la contribution hydrodynamique μ^h ; c'est ce qui fait l'objet des développements suivants.

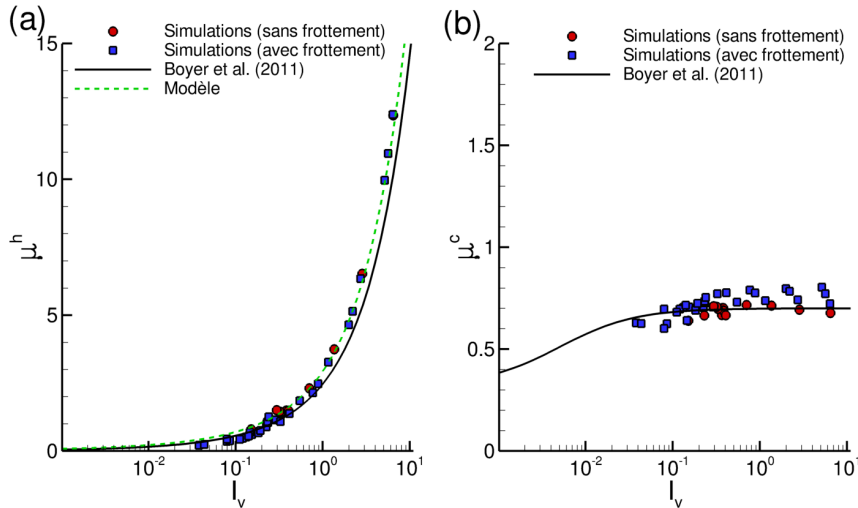


Fig. 9.17 – Coefficient de frottement effectif hydrodynamique μ^h (a) et de contact μ^c (b) en fonction de I_v pour des simulations avec des particules non-frottantes (en rouge) et frottantes (en bleu). La ligne noire représente un ajustement des résultats expérimentaux de Boyer, soit Eq. (9.7) avec $\phi_m=0,585$. La ligne verte en pointillés est le modèle Eq. (9.12) avec $\phi_m=0,64$ et $n=0,4$.

Nous avons précédemment remarqué en §9.2 que l'approximation $\eta^h \approx \eta_\infty^r$ reste très bonne jusqu'à $\phi \approx 0,4$ et s'avère donc justifiée en régime semi-dilué. Par ailleurs, la viscosité à fréquence

infinie η_∞^r est facilement accessible et les simulations du chapitre sur les validations ont montré que cette viscosité pouvait être correctement modélisée par

$$\eta_\infty^r = \left(1 - \frac{\phi}{\phi'_m}\right)^{-[\eta]\phi'_m} \quad (9.10)$$

avec $[\eta] \approx 2,32$ et $\phi'_m \approx 0,68$. L'approximation $\eta^h \approx \eta_\infty^r$ est alors utilisée en combinaison avec la relation Eq. (9.10) puis est injectée dans Eq. (9.5) pour fournir

$$\mu^h = I_v \left(1 - \frac{\phi_m}{\phi'_m} \frac{1}{1 + I_v^n}\right)^{-[\eta]\phi'_m} \quad (9.11)$$

Notons que lorsque I_v est grand, et en prenant $\phi'_m \approx \phi_m$, cette expression se simplifie en

$$\mu^h = I_v + [\eta]\phi_m I_v^{1-n} \quad (9.12)$$

ce qui redonne le modèle de Boyer Eq. (9.7) avec un léger changement d'exposant, soit $1-n=0,6$ à la place de 0,5 dans le modèle d'origine. C'est cette loi qui était tracée en Fig. 9.17(a) et Fig. 9.16 (en y rajoutant μ^c) et qui permet un meilleur accord avec nos simulations pour les fractions volumiques faibles.

Les résultats précédents Fig. 9.15 à Fig. 9.17 reprenaient l'ensemble de nos simulations pour illustrer le fait que celles-ci se superposaient relativement bien sur une courbe maîtresse unique et ce, indépendamment de la nature des particules (rugosité, frottement, raideur, ...). Bien que l'accord global reste bon, il existe toutefois quelques dispersions et les points ne s'agencent en fait pas exactement sur une courbe unique. En d'autres termes, les calculs suggèrent qu'il existe un effet – limité – des caractéristiques des particules. Parmi les paramètres étudiés, le frottement s'avère jouer le rôle le plus important.

La Fig. 9.18 reconsidère les résultats de $\phi(I_v)$, déjà présentés en Fig. 9.15, mais en ne retenant que les particules non-frottantes ($\mu_d=0$) et frottantes avec $\mu_d=0,5$ et une rugosité $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

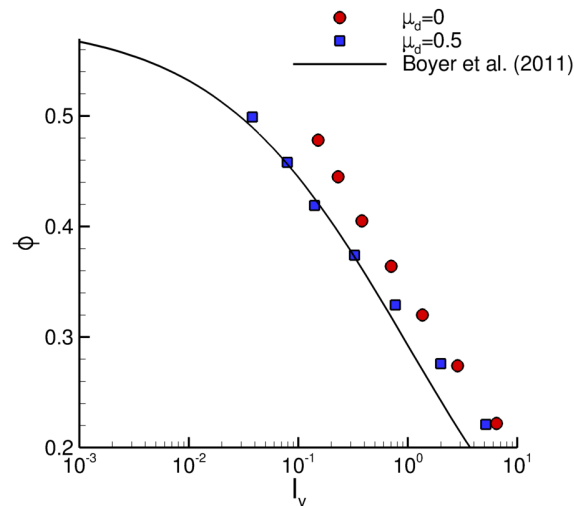


Fig. 9.18 – Fraction volumique ϕ en fonction de I_v pour des simulations avec des particules non-frottantes (rouge) et frottantes $\mu_d=0,5$ (en bleu). La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$. La ligne noire représente un ajustement des résultats expérimentaux de Boyer, soit Eq. (9.5) avec $\phi_m=0,585$ et $n=0,5$.

Les écarts mentionnés précédemment se distinguent assez nettement ici et montrent que, *stricto sensu*, une unique courbe maîtresse n'existe pas du fait du frottement entre particules. Cet effet n'est

pas noté dans les résultats expérimentaux de Boyer *et al.* (2011) d'une part du fait de la difficulté expérimentale de faire varier notablement le coefficient de frottement et peut-être d'autre part, parce que des nombres I_v très faibles sont considérés, régime dans lequel le frottement pourrait avoir un rôle différent. Il est toutefois intéressant de constater que les simulations avec frottement sont plus proches de la corrélation expérimentale, suggérant que ce frottement est effectivement à l'œuvre dans les suspensions. Ceci est particulièrement le cas pour les fractions volumiques les plus hautes. Une régression sur les résultats $\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$ fournit respectivement $\phi_m \approx 0,69$ et $\phi_m \approx 0,62$ et donc une valeur de ϕ_m en frottant se rapprochant de la mesure ($\phi_m \approx 0,585$).

9.9 Diffusion

Cette partie aborde le rôle du frottement sur la diffusion des particules. Pour une suspension non-brownienne, cette diffusion traduit la dérive stochastique de la position d'une particule individuelle du fait de son comportement chaotique et traduit un caractère irréversible. Deux cas seront traités dans le cadre de ce travail. Le premier est un cisaillement constant et le second un cisaillement oscillant. Ces deux configurations ont été étudiées expérimentalement dans des géométries simples et donc tout à fait accessibles au calcul. Elles ont également fait l'objet de simulations (avec des particules non-frottantes) mais dans les deux cas, l'accord entre expérience et simulation s'est révélé assez décevant. L'objectif de cette partie est d'étudier dans quelle mesure le frottement – qui joue un rôle important sur la rhéologie – pourrait également modifier le déplacement individuel de chaque particule.

Dans ce qui suit, le coefficient de diffusion D_{ii} sera calculé de manière usuelle en étudiant l'évolution temporelle du déplacement moyen quadratique $\langle X_i(t)X_i(t) \rangle$ des particules. Après un temps suffisant, ce déplacement augmente linéairement avec le temps, ce qui traduit un mouvement diffusif. Le coefficient de diffusion D_{ii} est donné par la demi-pente du déplacement quadratique moyen aux temps longs, soit

$$D_{ii} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \frac{d\langle X_i(t)X_i(t) \rangle}{dt} \quad (9.13)$$

En effet, l'évolution de $\langle X_i(t)X_i(t) \rangle$ n'est pas linéaire aux temps courts mais généralement quadratique ($\langle X_i(t)X_i(t) \rangle \propto t^2$) car le déplacement des particules est déterministe et fortement corrélé. Le régime diffusif n'est souvent atteint qu'après un temps de l'ordre d'une dizaine de $\dot{\gamma}^{-1}$ quand les particules ont subi assez d'interactions pour oublier leur configuration et vitesses initiales. Le coefficient D_{ii} est calculé par Eq. (9.13) lorsque ce régime linéaire est atteint. Nous veillons également à conserver un nombre suffisant de particules (supérieur à 500) pour limiter les incertitudes de calcul sur les coefficients de diffusion (Sierou et Brady, 2004).

9.9.1 Cisaillement stationnaire

Dans leur étude sur le transfert de chaleur dans les suspensions, Metzger *et al.* (2013) mesurent le coefficient de diffusion dans des suspensions non-inertielles en cisaillement pour différentes fractions volumiques. Le déplacement des particules est explicitement suivi jusqu'à une déformation maximale d'environ 7. Des simulations par LBM ("*Lattice Boltzmann Method*") sont également réalisées mais sous-estiment notablement la diffusion.

Dans le cadre de ce travail, nous simulons la configuration étudiée par Metzger *et al.* (2013) en tentant de se rapprocher au maximum de la géométrie et de la procédure d'exploitation utilisée expérimentalement, à savoir :

- l'entrefer du rhéomètre est de taille $12a$
- seules les particules se situant à plus d'un diamètre des parois sont considérées pour la diffusion

- le coefficient de diffusion est calculé pour une déformation comprise entre 2 et 7
- avant acquisition, la suspension est précisailée
- les mesures sont réalisées neuf fois de suite pour chaque fraction volumique

Ces conditions expérimentales ont été suivies strictement pour les simulations. On notera toutefois que la déformation maximale de 7 – accessible expérimentalement – est faible, ce qui peut conduire à une sous-estimation du coefficient de diffusion (Sierou et Brady, 2004). Nos simulations sur cette configuration montrent qu'il faut une déformation d'environ 10 pour atteindre la valeur asymptotique et que cette valeur légèrement inférieure de 7 n'induit qu'un écart d'environ 10 % sur les coefficients de diffusion.

La Fig. 9.19 présente le déplacement quadratique moyen $\langle Y(t)Y(t) \rangle$ des particules en fonction de la déformation. On note clairement l'évolution quadratique aux faibles déformations puis linéaire pour les déformations supérieures à environ 10.

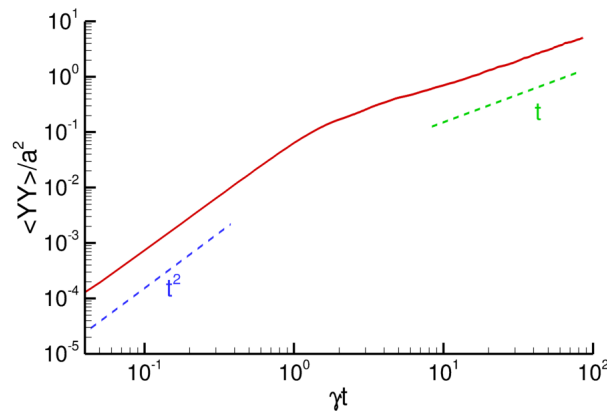


Fig. 9.19 – Déplacement quadratique moyen $\langle Y(t)Y(t) \rangle / a^2$ en fonction de la déformation $\dot{\gamma}t$ à $\phi_{bulk}=0,35$ ($\xi_{rug}=5.10^{-3}$; $\mu_d=0$).

La Figure 9.20 montre le coefficient de diffusion normalisé $D_{yy} / \dot{\gamma} a^2$ dans la direction du gradient de vitesse en fonction de la fraction volumique pour deux coefficients de frottement μ_d (0 et 0,5). Les barres d'erreur (expérimentales ou numériques) représentent une incertitude statistique évaluée par l'écart-type du coefficient de diffusion sur les neuf simulations/expériences. Toutes les simulations sont réalisées avec des particules de rugosité réduite $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

L'évolution du coefficient de diffusion est identique pour les simulations et les mesures, à savoir une augmentation nette dans un premier temps, avec un maximum vers $\phi \approx 0,35 \sim 0,4$, suivie d'une décroissance marquée. Cette dernière est en partie liée au confinement de la suspension : pour les fortes fractions volumiques, l'écoulement est fortement structuré et le mouvement des particules est contraint d'où la diminution du coefficient de diffusion. Des simulations réalisées pour une suspension moins confinée montrent un décalage de cette décroissance vers des fractions volumiques plus élevées. En dehors de cet effet de confinement, les simulations plaident en faveur d'une loi quadratique : $D_{yy} \propto \phi_{bulk}^2$, conformément aux simulations de la littérature (Drazer *et al.*, 2002; Sierou et Brady, 2004).

L'intérêt de ces calculs est de montrer – encore un fois – que la prise en compte du frottement permet de se rapprocher des mesures. C'est en particulier très net sur les maxima des coefficients de diffusion, à $\phi_{bulk}=0,35$ et $\phi_{bulk}=0,4$, avec un doublement de D_{yy} pour $\mu_d=0,5$ par rapport au cas non-frottant. Les forces de frottement n'ont pas seulement de rôle sur les grandeurs rhéologiques, elles modifient également l'écoulement même de la suspension.

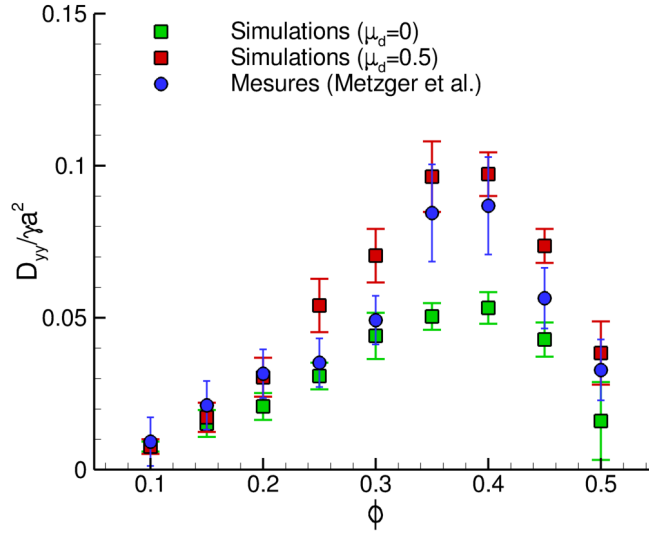


Fig. 9.20 – Coefficient de diffusion normalisé $D_{yy}/\dot{\gamma}a^2$ en fonction de la fraction volumique. La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$ et le coefficient de frottement $\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$. Mesures de Metzger *et al.* (2013).

Cette augmentation de la diffusion dans une suspension frottante peut être illustrée qualitativement en visualisant la configuration des particules comme en Figure 9.21. La suspension – façon tranche napolitaine – est non-frottante pour les deux images supérieures (en rouge) et frottante ($\mu_d=0,5$) pour les images inférieures (en bleu). Pour ces deux suspensions, les configurations à gauche sont les états (précisaillés) initiaux ($\gamma=0$) et les configurations après 20 déformations ($\gamma=20$) sont présentées à droite. Notons que cette suspension n'est pas celle étudiée précédemment et la hauteur L_y est ici portée à $20a$ (au lieu de $12a$) pour une meilleure représentation.

Même si cette analyse – basée sur des configurations instantanées – ne peut rester que qualitative, il apparaît clairement que les particules colorées, initialement cantonnées aux régions pariétales, diffusent beaucoup plus vite vers le centre de l'écoulement dans le cas frottant (en bleu). Dans le cas non-frottant (en rouge), les particules explorent des régions beaucoup plus restreintes et restent confinées à la paroi.

9.9.2 Cisaillement oscillant

Les travaux de Pine *et al.* (2005) ont clairement démontré l'existence d'un seuil d'irréversibilité pour les suspensions cisailées. Dans leur expérience, une suspension non-brownienne et non-colloïdale est cisailée de manière périodique dans un rhéomètre de Couette et les particules sont suivies individuellement. La déformation imposée est sinusoïdale et donnée par $\gamma = \gamma_0 \sin(2\pi t/T)$ avec T la période et γ_0 l'amplitude de la déformation. A $t=T/4$, la suspension est déformée de γ_0 puis le cisaillement est inversé et à $t=T/2$, la déformation redevient nulle et il est possible de vérifier si les particules reviennent bien à leur position initiale (réversibilité). Les résultats obtenus par Pine *et al.* (2005) montrent que le mouvement des particules est effectivement réversible uniquement lorsque l'amplitude de la déformation γ_0 est plus petite qu'un certain seuil γ_{seuil} , qui dépend de la fraction volumique, mais reste de l'ordre de l'unité.

Les simulations proposées ici cherchent à se rapprocher au plus de la configuration étudiée, soit des particules de rayon $a=115 \mu\text{m}$ dans un écoulement de cisaillement périodique. L'entrefer du rhéomètre est $L_y=2,5 \text{ mm}$, soit un confinement $L_y/a \approx 22$. Le taux de cisaillement imposé vaut

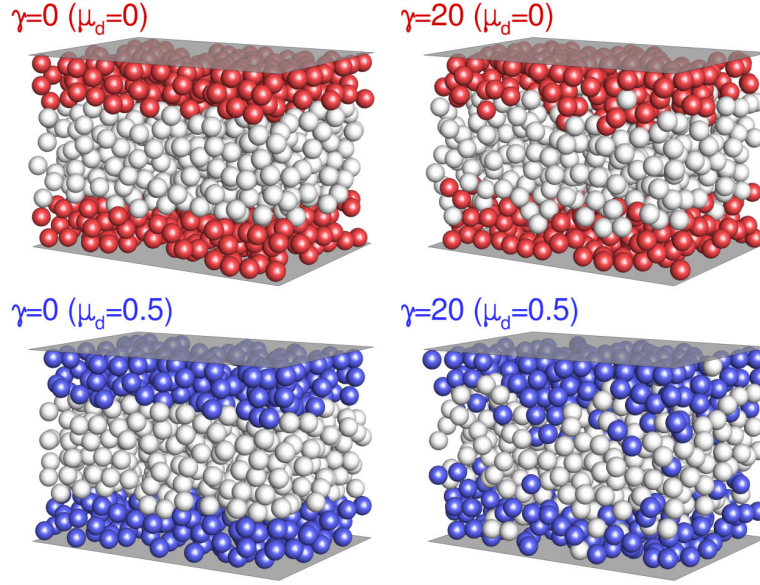


Fig. 9.21 – Configurations instantanées pour une suspension non-frottante (rouge, en haut) et frottante avec $\mu_d=0,5$ (bleue, en bas). Les états initiaux ($\gamma=0$) sont à gauche. Les deux images de droite représentent la suspension après une déformation $\gamma=20$.

$\dot{\gamma} = d\gamma/dt = 2\pi\gamma_0/T \cos(2\pi t/T)$ avec une période T fixée à $2\pi \approx 6,28$ s. (entre 5 et 100 s. dans les expériences). La simulation est poursuivie sur environ $100T$ et le pas de temps est choisi à $5 \cdot 10^{-4} \gamma_0^{-1}$. La microstructure initiale est aléatoire (pas de précisaillement). Le coefficient de diffusion est calculé sur toutes les particules dans les directions de la vitesse (x) et de la vorticité (z). Comme dans Pine *et al.* (2005), ce coefficient est adimensionné par le carré du diamètre des particules et par $4\gamma_0/T$, soit

$$D_{ii}^* = D_{ii} \frac{T}{16\gamma_0 a^2} \quad (9.14)$$

Le déplacement quadratique utilisé pour estimer ce coefficient de diffusion est ici calculé entre chaque période T , comme dans l'expérience. L'étude s'est consacrée à la fraction volumique $\phi_{bulk}=0,4$ (comportant environ 800 particules), qui est la plus détaillée expérimentalement et a fait l'objet de simulations numériques par SD. Dans un premier temps, les simulations sont réalisées pour des particules non-frottantes ($\mu_d=0$) afin de pouvoir nous confronter aux calculs SD de Pine *et al.* (2005). Cette comparaison est effectuée en Fig. 9.22 où les coefficients D_{xx}^* et D_{zz}^* sont tracés en fonction de l'amplitude de la déformation γ_0 . Un premier constat est la cohérence entre nos simulations et celles publiées. Même si l'échelle est logarithmique, l'écart entre les deux calculs reste limité que ce soit pour D_{xx}^* ou D_{zz}^* . La seule exception concerne D_{xx}^* à forte déformation où les prédictions par SD fournissent des valeurs nettement plus élevées. Une piste d'explication sera fournie par la suite.

Les simulations retrouvent au moins qualitativement les tendances expérimentales, à savoir une faible diffusion en dessous d'un certain seuil de γ_0 , de l'ordre de 1, puis une franche augmentation au-delà de ce seuil qui marque donc une transition entre un régime réversible et irréversible. Plus précisément, cette transition s'effectue pour un γ_{seuil} entre 0,5 et 1 expérimentalement et, pour les simulations, entre 1 et 1,5. Pour des déformations importantes, les coefficients de diffusion saturent. La transition réversible/irréversible est toutefois beaucoup plus abrupte expérimentalement avec une augmentation de trois ordres de grandeur alors que les simulations fournissent plutôt de l'ordre de deux ordres de grandeur. Comme postulé par Pine *et al.* (2005), il est possible que des incertitudes numériques (précision numérique, existence d'un pas de temps fini,...) ne puissent pas permettre d'obtenir les valeurs très faibles de diffusion notées expérimentalement en-dessous du seuil ($10^{-5} \sim$

10^{-6}).

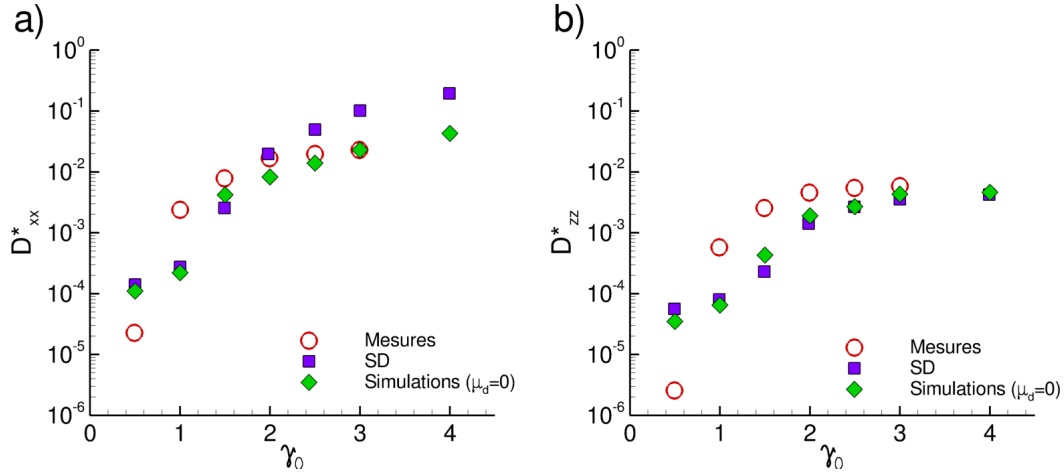


Fig. 9.22 – Coefficients de diffusion D_{xx}^* (a) et D_{zz}^* (b) en fonction de l'amplitude de la déformation γ_0 pour $\phi_{bulk}=0,4$. Comparaison avec les mesures et simulations par SD de Pine *et al.* (2005). Les particules sont non-frottantes ($\mu_d=0$) et de rugosité réduite $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

Les simulations présentées en Fig. 9.23 intègrent les résultats avec des particules frottantes ($\mu_d=0,5$). L'effet du frottement le plus notable est une diminution du seuil d'irréversibilité γ_{seuil} qui passe entre 0,5 et 1, soit la valeur expérimentale. Le frottement joue donc un rôle clé dans l'apparition du comportement irréversible d'une suspension cisailée et confirme que ce sont bien les contacts qui gouvernent cette irréversibilité. Le frottement contribue également à des coefficients de diffusion plus élevés, en cohérence avec les simulations précédentes en cisaillement stationnaire. Les valeurs obtenues se rapprochent nettement des expériences et démontrent encore une fois que la prise en compte du frottement dans les simulations permet de mieux représenter la physique des suspension réelles.

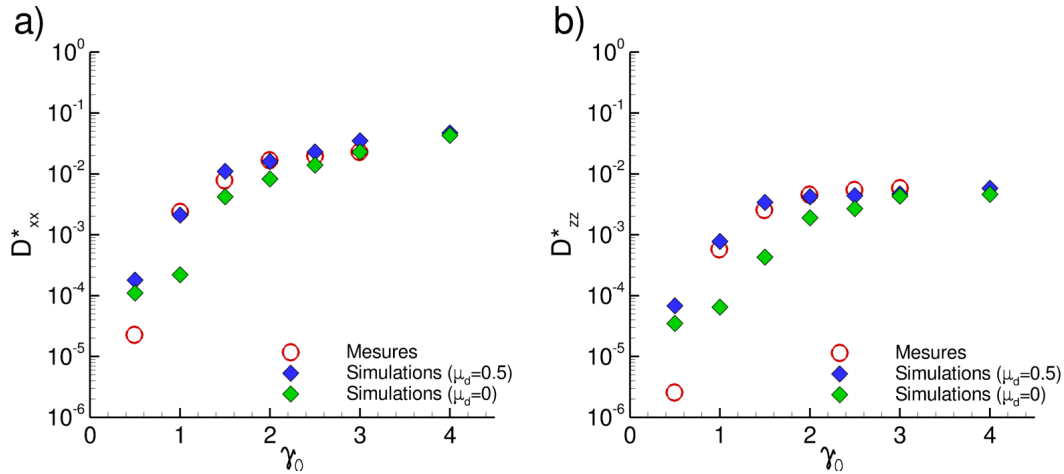


Fig. 9.23 – Coefficients de diffusion D_{xx}^* (a) et D_{zz}^* (b) en fonction de l'amplitude de la déformation γ_0 pour $\phi_{bulk}=0,4$ et des particules non-frottantes ($\mu_d=0$) et frottantes $\mu_d=0,5$. La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

La figure suivante (Fig. 9.24) illustre de manière plus graphique cette diffusion en présentant la position du centre des particules après 50 périodes à $\gamma_0=1$ dans le cas non-frottant. Si la suspension était parfaitement réversible, chaque particule reviendrait à sa place initiale tous les $T/2$ et seuls des

points seraient visibles sur cette figure. Dans la situation présente – très légèrement irréversible – ce n'est pas tout à fait le cas et les particules dérivent lentement, cycles après cycles, de leurs positions initiales d'où ces trajectoires lombricoïdes sur la figure.

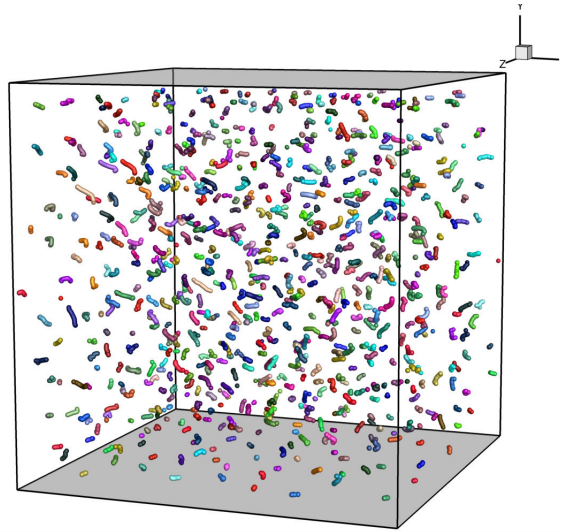


Fig. 9.24 – Trajectoires des centres des particules après 50 périodes à $\gamma_0=1$ ($\phi_{bulk}=0,4$; $\mu_d=0$).

Près de la paroi inférieure ou supérieure, les trajectoires semblent plus ponctuelles, signe d'une irréversibilité moins marquée. Ceci peut provenir d'une structuration locale ou de l'action de la lubrification qui entrave le déplacement des particules en proche paroi. Un calcul des coefficients de diffusion D_{xx} dans la zone de cœur \mathcal{D}_{core} et la zone de paroi \mathcal{D}_{wall} montre que ceux-ci sont environ 2,5 fois plus grands dans \mathcal{D}_{core} que dans \mathcal{D}_{wall} . Dans la mesure où les simulations SD publiées ne prennent pas en compte les parois, il est possible que cela explique la surestimation de D_{xx} pour les fortes amplitudes γ_0 comme noté en Figure 9.22(a). Une autre source de différence entre les simulations réside dans le cisaillement imposé : nous imposons un signal sinusoïdal comme dans l'expérience alors que les calculs SD considèrent une succession d'inversions de cisaillement.

Des travaux postérieurs (Corte *et al.*, 2008) ont proposé, grâce à un modèle de collision simple, que l'état réversible ($\gamma_0 < \gamma_{seuil}$) s'accompagne d'une auto-organisation de la suspension avec l'apparition d'un état absorbant dans lequel les particules sont agencées de manière à ne plus entrer en contact.

Nos résultats de simulation permettent d'estimer un nombre de contacts instantanés moyenné au cours du temps $\langle N_{contact} \rangle$ (Fig. 9.25(a)). La Fig. 9.25(b) présente quant à elle la contrainte de contact Σ_{xy}^c en moyenne temporelle quadratique $\|\Sigma_{xy}^c\|_2 = \langle \Sigma_{xy}^{c2} \rangle^{1/2}$ adimensionnée par γ_0 . Le nombre de contact moyen $\langle N_{contact} \rangle$ croît avec la déformation et avec une évolution très proche de celle du coefficient de diffusion, ce qui tend à confirmer le lien entre irréversibilité et contact. Soulignons que $\langle N_{contact} \rangle$ n'augmente pas linéairement avec γ_0 . Cependant, même pour $\gamma_0=0,5$, il ne semble pas exister d'état absorbant sans contacts, avec une persistance de quelques dizaines de contacts en moyenne.

Le seuil γ_{seuil} est nettement visible sur la contrainte de contact en Fig. 9.25(b), surtout dans le cas frottant avec une variation de deux ordres de grandeur. Aux plus faibles γ_0 , des contacts subsistent effectivement mais ne conduisent qu'à des contraintes faibles. Il peut être pertinent de proposer une notion d'« efficacité » du contact : pour $\gamma_0 < \gamma_{seuil}$ les contacts existent mais sont peu efficaces pour entraîner une diffusion notable des particules. Un résultat intéressant est que pour les déformations élevées ($\gamma_0 \geq 2$), le rapport $\|\Sigma_{xy}^c\|_2 / \gamma_0 \langle N_{contact} \rangle$ atteint une valeur constante et que, par conséquent, l'efficacité du contact reste identique. Cette valeur est de l'ordre de $2 \cdot 10^{-3}$ et $3 \cdot 10^{-3}$, respectivement

pour les contacts non-frottants et frottants.

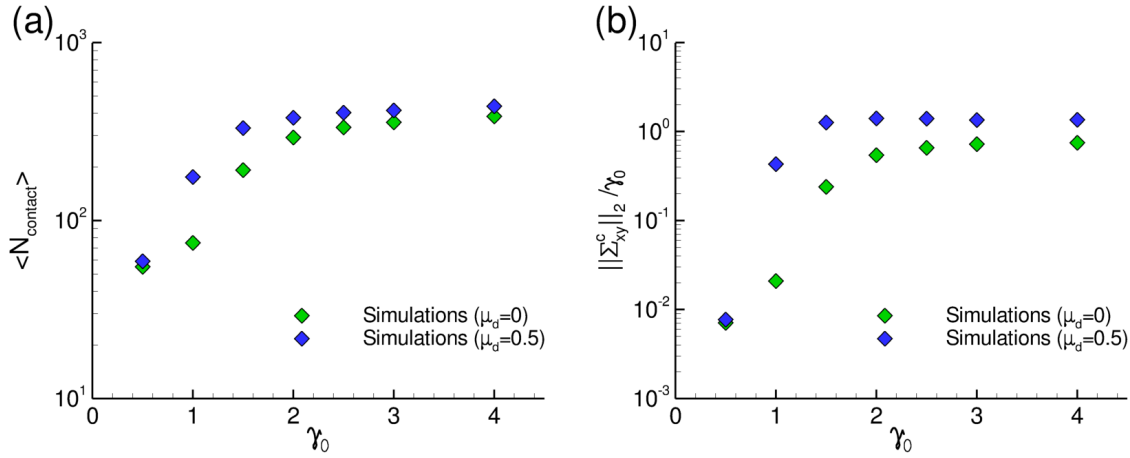


Fig. 9.25 – Nombre moyen de contacts $\langle N_{\text{contact}} \rangle$ (a) et contrainte de contact moyenne $\|\Sigma_{xy}^c\|_2 / \gamma_0$ (b) en fonction de l'amplitude de la déformation γ_0 pour des particules non-frottantes $\mu_d=0$ et frottantes $\mu_d=0,5$ ($\phi_{\text{bulk}}=0,4$; $\xi_{\text{rug}}=5 \cdot 10^{-3}$).

9.10 Écoulement

Les effets sensibles notés précédemment sur la diffusion suggèrent que la présence des forces de frottement joue sur l'écoulement même de la suspension. Pour tenter de mieux quantifier ce rôle, une première étape consiste à étudier les fluctuations de vitesse des particules et l'on notera σ l'écart-type de celles-ci, par exemple $\sigma_V = \langle V' V' \rangle^{1/2}$. Pour la vitesse axiale U , seule la partie non-affine est considérée, soit

$$U' = U - \langle \bar{U}(y) \rangle \quad (9.15)$$

où $\bar{U}(y)$ est la vitesse moyennée dans les directions homogènes (en x et z) et $\langle . \rangle$ dénote la moyenne temporelle. De même pour la rotation selon \mathbf{e}_z où la moyenne sera retranchée $\Omega'_z = \Omega_z - \langle \bar{\Omega}_z \rangle$. Toutes les fluctuations présentées sont estimées dans le cœur homogène $\mathcal{D}_{\text{core}}$ de la suspension.

Le tableau suivant Tab. 9.1 recense les écarts-types obtenus sur les six vitesses dans le cas non-frottant ($\mu_d=0$) et frottant ($\mu_d=0,5$). Ces écarts-types sur les vitesses de translation sont adimensionnés par $\dot{\gamma}_{\text{core}} a$ et par $\dot{\gamma}_{\text{core}}$ pour les vitesses de rotation. Le cas traité est une suspension à la fraction $\phi_{\text{bulk}}=0,4$ avec des particules rugueuses ($\xi_{\text{rug}}=5 \cdot 10^{-3}$) et un domaine $L_y=20a$.

σ	$\mu_d=0$	$\mu_d=0,5$
U	0,53	0,90
V	0,51	0,70
W	0,39	0,57
Ω_x	0,17	0,50
Ω_y	0,16	0,56
Ω_z	0,24	0,79

Tab. 9.1 – Effet du coefficient de frottement sur l'écart-type des vitesses des particules (dans $\mathcal{D}_{\text{core}}$) pour $\phi_{\text{bulk}}=0,4$. Les écarts-types sur les vitesses de translation et rotation sont respectivement adimensionnés par $\dot{\gamma}_{\text{core}} a$ et $\dot{\gamma}_{\text{core}}$. Les fluctuations sont calculées par $X' = X - \langle \bar{X}(y) \rangle$.

L'effet du frottement est marqué en particulier pour les vitesses de rotation avec un triplement des fluctuations dans ce cas. Ce dernier résultat n'est pas surprenant outre mesure puisque la force tangentielle de contact induit désormais un moment sur les particules. Les fluctuations de vitesse de translation sont également plus importantes d'environ 70 % pour U , 40 % pour V et 50 % pour W , ce qui est compatible avec une augmentation du coefficient de diffusion. Au final, le frottement conduit à une modification du déplacement individuel des particules et donc de l'écoulement global de la suspension.

Une analyse plus détaillée met en lumière un aspect instationnaire important : celui de la variation temporelle du champ moyen $\bar{U}(y)$. Il est en effet courant pour estimer les fluctuations de retrancher la valeur moyenne temporelle $\langle \bar{U}(y) \rangle$ comme dans Eq. (9.15). En cisaillement simple, on retrouve alors bien la loi linéaire $\langle \bar{U}(y) \rangle = \dot{\gamma}_{core} y$. Cependant, le profil $\bar{U}(y)$ s'avère fluctuer au cours du temps et la variance $\langle \bar{U}(y) \bar{U}(y) \rangle$ n'est pas nulle. Les écarts-types sur U' présentés en Tab. 9.1 sont donc majorés car ils incluent la fluctuation du champ moyen $\bar{U}(y)$. Il est alors plus légitime de définir U' par $U - \bar{U}(y)$ et non plus par $U - \langle \bar{U}(y) \rangle$. Les nouveaux écarts-types adimensionnés calculés pour U' passent alors de 0,53 à 0,43 dans le cas non-frottant et de 0,90 à 0,62 dans le cas frottant ($\mu_d=0,5$). La fluctuation de $\bar{U}(y)$ participe donc notablement à la fluctuation totale.

D'un point de vue formel, cet effet doit aussi exister sur les autres vitesses, même celles de moyenne temporelle nulle. L'exercice a été fait et ne conduit qu'à des variations très faibles, sauf sur la vitesse W' avec une diminution d'environ 10 % (voir les résultats en Tab. 9.2) : la vitesse axiale U est donc celle qui est majoritairement affectée. Il est à noter qu'avec ces nouvelles valeurs, l'effet du frottement devient isotrope et affecte désormais les trois composantes de vitesse de translation de la même façon avec une augmentation de 40 %. L'importance de cette fluctuation de $\bar{U}(y)$ ne semble pas avoir reçu d'attention spécifique dans les travaux antérieurs et il est possible que ce comportement soit lié à la présence des parois et au confinement. Ce point reste toutefois à approfondir.

σ	$\mu_d=0$	$\mu_d=0,5$
U	0,43	0,62
V	0,51	0,71
W	0,34	0,49
Ω_x	0,16	0,49
Ω_y	0,15	0,55
Ω_z	0,24	0,77

Tab. 9.2 – Effet du coefficient de frottement sur l'écart-type des vitesses des particules (dans \mathcal{D}_{core}) pour $\phi_{bulk}=0,4$. Les écarts-types sur les vitesses de translation et rotation sont respectivement adimensionnés par $\dot{\gamma}_{core}a$ et $\dot{\gamma}_{core}$. Les fluctuations sont calculées par $X' = X - \bar{X}(y)$.

Cette fluctuation du champ moyen traduit probablement des mouvements de translation en bloc de certaines zones de la suspension. Instationnairement (i.e., à un instant t donné), le profil $\bar{U}(y)$ peut ne pas être tout à fait linéaire avec des vitesses moyennes $\int \bar{U}(y) dy$ non-nulles. En moyenne temporelle, on a bien $\langle \bar{U}(y) \rangle$ linéaire de moyenne nulle.

La Fig. 9.26 présente la densité de probabilité (calculée dans \mathcal{D}_{core}) des fluctuations de vitesse U' , adimensionnées par $\dot{\gamma}_{core}a$, pour le cas frottant et non-frottant, et selon la manière de calculer la fluctuation U' . La distribution est plus étalée dans le cas frottant, en cohérence avec une variance plus élevée, et les fluctuations peuvent alors atteindre environ trois fois la vitesse relative $\dot{\gamma}_{core}a$. Le choix d'une fluctuation $U' = U - \bar{U}(y)$ (Fig. 9.26(b)) réduit la variance, conformément aux remarques précédentes, mais ne modifie pas la forme des distributions. Dans tous les cas, celles-ci sont

relativement gaussiennes : une régression fournit une loi de type $f(U') \propto \exp(-U'^\beta)$ avec $\beta \approx 1,8$ indépendamment de la présence ou non de frottement ou du choix de la fluctuation. Une distribution quasi-gaussienne est également retrouvée dans d'autres travaux dès lors que la suspension est suffisamment concentrée (Abbas, 2008; Drazer *et al.*, 2004). Dans ce cas, les interactions entre particules sont fréquentes ce qui conduit à une décorrélation temporelle rapide des fluctuations de vitesse et donc à une loi gaussienne. Les distributions obtenues pour les autres vitesses sont similaires et ne sont pas représentées ici.

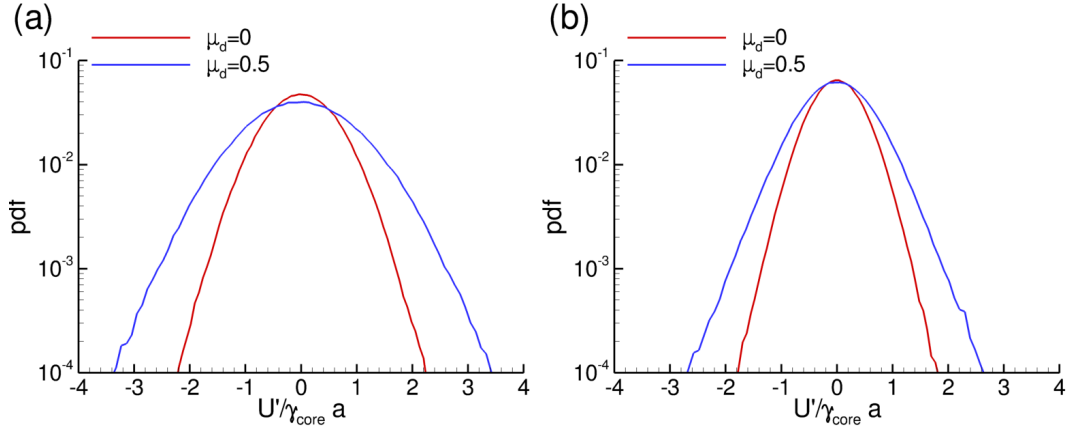


Fig. 9.26 – Distribution des fluctuations de vitesse de translation non-affine $U'/\dot{\gamma}_{core}a$ calculées dans \mathcal{D}_{core} pour des particules non-frottantes ($\mu_d=0$) et frottantes ($\mu_d=0,5$) à $\phi_{bulk}=0,4$. Les fluctuations sont calculées par $U' = U - \langle \bar{U}(y) \rangle$ (a) et $U' = U - \bar{U}(y)$ (b).

La corrélation spatiale des vitesses est également source d'informations pertinentes sur le mouvement global des particules. Elle est ici définie pour les vitesses U' et V' par

$$G_U(\delta x, \delta y) = \frac{\langle U'(x, y) U'(x + \delta x, y + \delta y) \rangle}{\sigma_U^2} \quad (9.16)$$

$$G_V(\delta x, \delta y) = \frac{\langle V'(x, y) V'(x + \delta x, y + \delta y) \rangle}{\sigma_V^2} \quad (9.17)$$

Ces corrélations sont calculées dans la zone de cœur et dans le plan de cisaillement x - y ou, plus précisément, dans un volume d'épaisseur faible $\Delta z = a$ pour bénéficier d'un nombre de particules plus important et de meilleures statistiques. La Fig. 9.27 propose une distribution de la corrélation pour ces deux vitesses dans le cas non-frottant ($\mu_d=0$) et frottant ($\mu_d=0,5$). Les fluctuations sont ici dans un premier temps calculées usuellement par $U' = U - \langle \bar{U}(y) \rangle$ et $V' = V$.

Il existe une différence assez nette selon la présence de frottement, principalement pour la vitesse axiale U' . Dans le cas non-frottant, les vitesses ne sont fortement corrélées qu'au très proche contact (et dans l'axe de la vitesse) et se décorrélent assez rapidement. Au contraire, la suspension frottante montre une corrélation très marquée sur une distance beaucoup plus importante et principalement dans la zone de compression.

La corrélation G_V est par contre assez peu différente selon la présence ou non de frottement et les vitesses V' se décorrélent assez vite dans la direction de la vitesse. Pour les deux composantes de vitesse U' et V' , il n'y a quasiment pas trace de corrélations négatives, ce qui montre une absence de mouvement de rotation en bloc au sein de la suspension. Au premier abord, ces résultats suggèrent qu'avec frottement, la vitesse axiale des particules reste corrélée sur une distance beaucoup plus grande avec donc une possible propension des particules frottantes à se déplacer « en bloc », peut-être à travers de plus larges amas. Nous verrons ultérieurement en Chap. 11 que le frottement conduit

effectivement à la création d'amas de particules statistiquement plus gros.

Pour ces derniers résultats, les corrélations de vitesse (en particulier sur U') ne reviennent pas à zéro même assez loin. Ceci est lié à la variation temporelle du champ moyen $\bar{U}(y)$. La Fig. 9.28 reprend ces champs de corrélation de vitesse mais en considérant les fluctuations $U' = U - \bar{U}(y)$ et $V' = V - \bar{V}$. Cette fois, les corrélations pour U et V retombent bien à zéro loin de la particule. Il ne subsiste alors que peu de différences entre les cas frottant et non-frottant, sauf peut-être au contact au niveau de l'axe de compression. Il semble ainsi que le frottement affecte modérément les corrélations de vitesse et joue principalement sur les fluctuations du mouvement moyen de la suspension.

Ces premières études sont clairement à caractère exploratoire et devront être poursuivies plus en détail pour éclaircir le mécanisme physique à la source de ces effets.

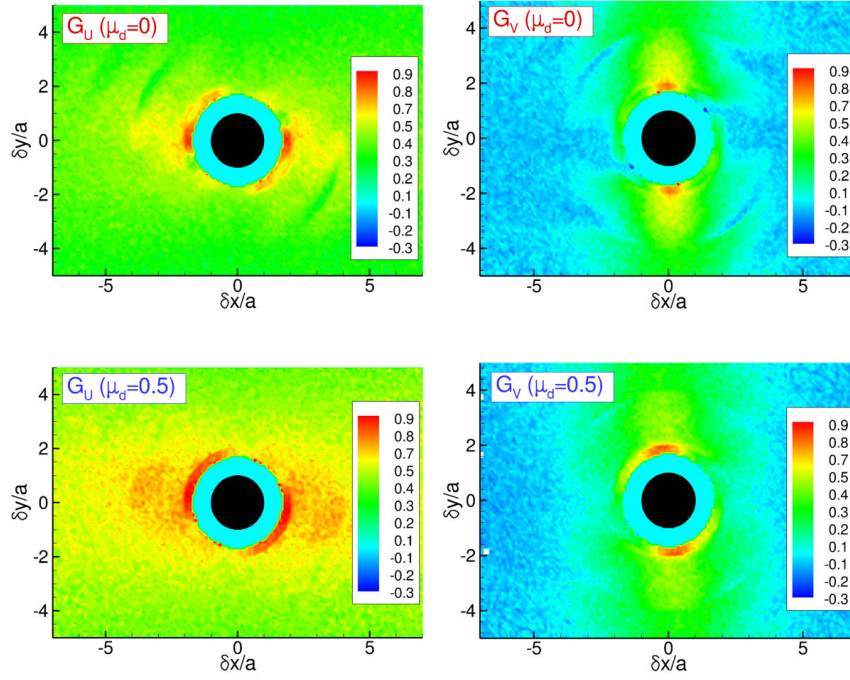


Fig. 9.27 – Autocorrélation spatiale $G_U(\delta x, \delta y)$ et $G_V(\delta x, \delta y)$ pour des particules non-frottantes ($\mu_d=0$) et frottantes ($\mu_d=0,5$) à $\phi_{bulk}=0,4$ ($L_y/a=20$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$). Les fluctuations sont calculées par $U' = U - \langle \bar{U}(y) \rangle$ et $V' = V$.

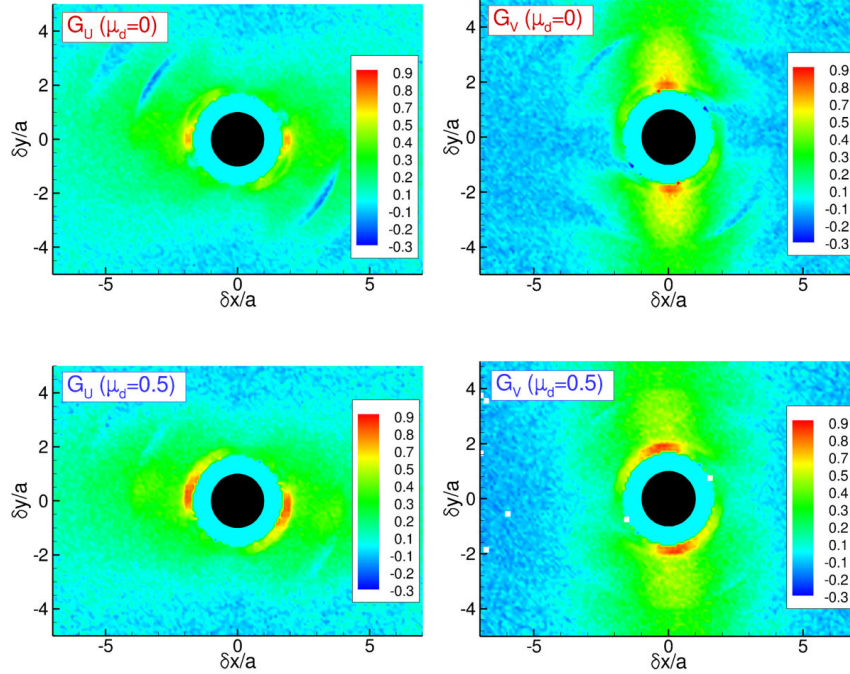


Fig. 9.28 – Autocorrélation spatiale $G_U(\delta x, \delta y)$ et $G_V(\delta x, \delta y)$ pour des particules non-frottantes ($\mu_d=0$) et frottantes ($\mu_d=0,5$) à $\phi_{bulk}=0,4$ ($L_y/a=20$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$). Les fluctuations sont calculées par $U' = U - \bar{U}(y)$ et $V' = V - \bar{V}$.

RÔLE DU CONFINEMENT DANS LES SUSPENSIONS

Sommaire

10.1 Objectifs	173
10.2 Structuration	174
10.3 Fraction volumique	175
10.4 Vitesse	178
10.5 Viscosité	180
10.6 Différences de contraintes normales	183
10.7 Lien avec les mesures	187

10.1 Objectifs

Les suspensions non-confinées (i.e., en milieu infini) commencent à être un peu mieux comprises en particulier grâce aux nombreuses simulations numériques, par dynamique stokésienne notamment. La connaissance des suspensions confinées est au contraire bien moins avancée du fait d'un nombre de travaux plus réduit.

Ces suspensions confinées sont pourtant foncièrement différentes du fait des parois qui modifient fortement l'écoulement à leur voisinage. Ces parois conduisent localement à une structuration des particules attestée par simulations (Komnik *et al.*, 2004; Kromkamp *et al.*, 2006; Nguyen et Ladd, 2002; Singh et Nott, 2000; Yeo et Maxey, 2010b). La formation de ces couches de particules à la paroi est également clairement visible expérimentalement (Blanc, 2011; Metzger *et al.*, 2013). Une cristallisation en structures hexagonales s'effectue près des parois dès $\phi=0,48$ (Yeo et Maxey, 2010d). Cet ordre peut persister sur des distances relativement importantes de l'ordre de $10a$ en régime concentré. Ces modifications locales conduisent également à des effets sensibles sur les grandeurs rhéologiques (Yeo et Maxey, 2010b,d) ou la diffusion (Yeo et Maxey, 2010a).

Cette partie du travail se consacre à l'étude du confinement sur la rhéologie d'une suspension concentrée. On évaluera particulièrement le rôle de la structuration pariétale sur les grandeurs rhéologiques comme la viscosité ou les différences de contraintes normales. En effet, la majeure partie des mesures disponibles est classiquement réalisée dans des rhéomètres où le confinement peut être important. Il s'agit donc ici aussi de contribuer à la compréhension des résultats expérimentaux en tentant d'estimer le rôle que peuvent avoir les parois.

Tous les calculs présentés dans cette partie considèrent des particules rugueuses de rugosité réduite $\xi_{rug}=5.10^{-3}$. Les simulations sont réalisées sur des déformations totales d'environ 200. Le confinement de la suspension sera estimé par le paramètre L_y/a où L_y est la hauteur de la suspension

(distance entre les deux parois imposant le cisaillement) et a le rayon des particules. D'un point de vue expérimental, la hauteur L_y correspond à l'entrefer d'un rhéomètre.

10.2 Structuration

Quantifier la structuration de la suspension peut se faire grâce aux paramètres d'ordre Q_6 et C_6 abordés dans la partie généralités (§4.1). Rappelons juste que Q_6 mesure un ordre dans l'orientation des voisins, alors que C_6 rend compte spécifiquement d'une structure hexagonale, et qu'ils sont tous deux nuls pour une structure désordonnée. La Figure 10.1 trace l'évolution de ces deux paramètres en fonction de la fraction volumique ϕ_{bulk} pour une suspension confinée à $L_y/a=20$.

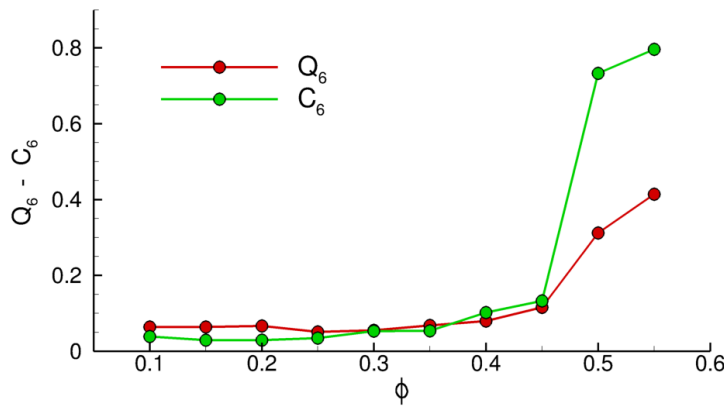


Fig. 10.1 – Paramètres d'ordre Q_6 et C_6 en fonction de la fraction volumique ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$).

Les deux paramètres suivent un profil assez similaire avec des valeurs très faibles pour les régimes dilués³⁸ et une augmentation brusque pour $\phi_{bulk} \approx 0,45 \sim 0,5$. Ces valeurs marquent donc – pour ce confinement L_y/a précis – le seuil entre un état désordonné et un état globalement ordonné. Les fortes valeurs de C_6 montrent que le système cristallise préférentiellement sous forme hexagonale.

Cette structuration peut être matérialisée plus concrètement en visualisant la suspension comme en Figure 10.2. Cette figure montre une configuration instantanée des particules pour une suspension à $\phi_{bulk}=0,5$ et $L_y/a=20$ dans le plan (x - y) de cisaillement (a) et dans le plan gradient de vitesse-vorticité (y - z) (b). Pour la clarté de la visualisation, les particules sont représentées à la moitié de leur taille réelle.

Les particules tendent à s'agencer en couches près des parois alors que le cœur de la suspension continue à conserver une structure plus désordonnée. La vue du plan (y - z) (Figure 10.2(b)) illustre clairement la structure hexagonale près des parois avec des particules organisées en quinconce. Chaque particule est au centre d'un hexagone formé de six de ses voisines. Cet ordre ressort également nettement via une représentation de la fonction de corrélation de paire $g(y,z)$ (non présentée ici).

³⁸. Notons que la valeur de Q_6 n'est strictement nulle que pour un système isotrope infini ($N \rightarrow \infty$) et pour des systèmes de taille finie, on a $Q_6 \propto 1/N$ (Rintoul et Torquato, 1996).

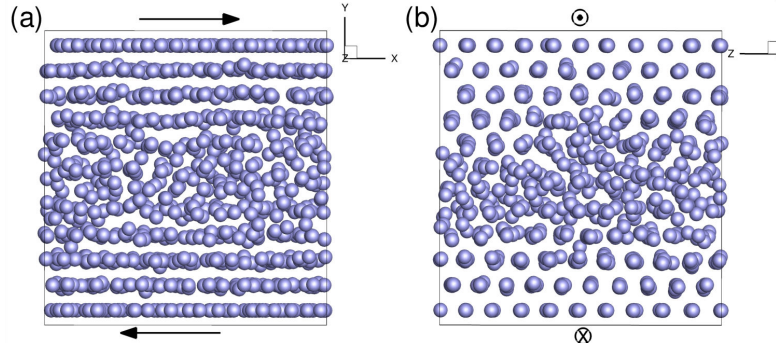


Fig. 10.2 – Configuration instantanée des particules ($\phi_{bulk}=0,5$; $\mu_d=0$) : (a) vue dans le plan (x - y) ; (b) vue dans le plan (y - z). Pour la visualisation, la taille des particules est réduite de moitié.

10.3 Fraction volumique

Dans le cadre de la définition des régions de cœur et de paroi de la suspension, nous avons déjà eu l'occasion de considérer une fraction volumique locale $\langle\phi(y)\rangle$ définie par Eq. (8.9), soit

$$\langle\phi(y)\rangle = \frac{1}{L_x L_z} \langle \iint \chi(\mathbf{x}) dx dz \rangle$$

où $\chi(\mathbf{x})$ est une fonction indicatrice de particule valant 1 dans la particule et 0 ailleurs. Quelques profils de $\langle\phi(y)\rangle$ avaient alors été présentés en fonction de la fraction moyenne ϕ_{bulk} . La Fig. 10.3 reprend ce type de résultats avec un peu plus de valeurs de ϕ_{bulk} entre 0,25 et 0,55 pour le cas $L_y/a=20$.

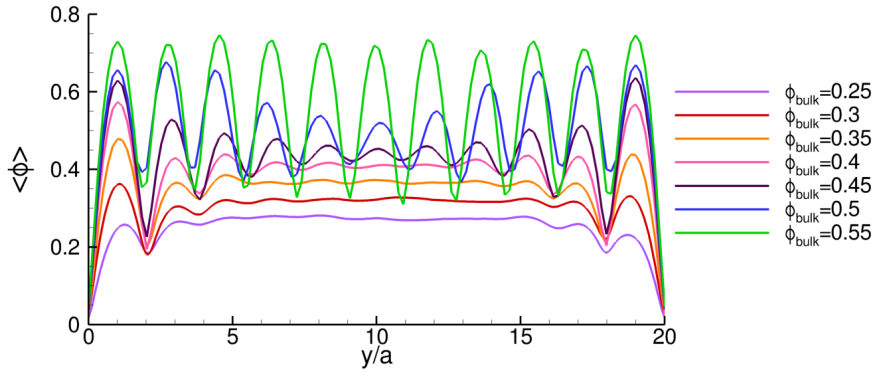


Fig. 10.3 – Fraction volumique locale $\langle\phi(y)\rangle$ pour différentes fractions volumiques moyennes ϕ_{bulk} ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$).

La fraction volumique locale montre la présence de pics en paroi caractéristiques d'une structuration locale en couches et ce, quelle que soit la fraction moyenne ϕ_{bulk} . Pour les suspensions les moins concentrées toutefois (par ex., $\phi_{bulk}=0,25$), cette structuration est peu prononcée et n'est visible que sur les deux premières couches ($y/a < 4$). Elle est de plus en plus marquée à mesure que la fraction moyenne augmente, à la fois en intensité (valeurs des pics) mais aussi en étendue. Pour $\phi_{bulk} \geq 0,45$, les effets de paroi s'étendent alors à toute la suspension pour ce confinement précis ($L_y/a=20$). Sans surprise, ce seuil correspond à l'augmentation brutale des paramètres d'ordre (Fig. 10.1). Pour $\phi_{bulk}=0,5$, les pics ont une amplitude un peu plus faible au centre de la suspension, du fait d'un ordre moins marqué ou non permanent (revoir Fig. 10.2) alors que pour $\phi_{bulk}=0,55$, ces pics sont identiques sur tout le domaine, signe d'une structuration établie dans la totalité de la suspension.

Dans ce dernier cas, la suspension comporte 11 couches de particules. Cette valeur est également retrouvée dans les simulations de Yeo et Maxey (2010d) qui ont étudié ce nombre de couches selon la commensurabilité de L_y et de a . La distance entre deux pics est donc légèrement inférieure à $2a$.

Ce type de profil de $\langle\phi(y)\rangle$ peut être exploité afin d'estimer approximativement la taille de la zone d'influence des parois, dénotée e_{paroi} . Bien entendu, il est nécessaire pour les suspensions les plus denses ($\phi_{bulk} \geq 0,45$) de considérer des hauteurs de canal L_y plus élevées que $20a$ comme précédemment afin que cette zone d'influence pariétale puisse se développer librement. La taille de cette dernière sera estimée grossièrement via un critère arbitraire $a\langle d\phi(y)/dy \rangle > 0,1$. Les résultats obtenus sont reportés sur la Fig. 10.4 dans laquelle la taille de domaine L_y utilisée a également été spécifiée.

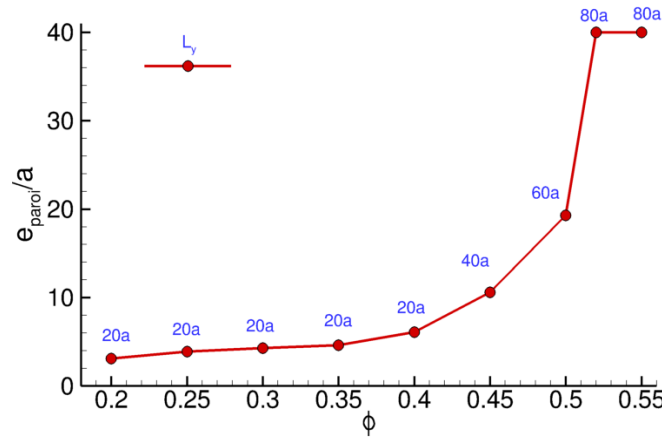


Fig. 10.4 – Etendue approximative de la zone d'influence des parois e_{paroi} en fonction de la fraction volumique. La valeur en bleu spécifie la hauteur L_y du domaine ($\mu_d=0$).

Pour les fractions inférieures à 0,4, cette zone s'étend progressivement avec la fraction ϕ_{bulk} mais reste de l'ordre de 3 à 6 rayons. Elle augmente par contre notablement au-delà et ce, malgré l'emploi de domaines beaucoup plus grands (jusqu'à $L_y=80a$). Si la valeur à $\phi_{bulk}=0,5$ peut être déterminée sans ambiguïté, ce n'est plus le cas dans des régimes plus denses comme à $\phi_{bulk}=0,52$ et $\phi_{bulk}=0,55$ où il semble qu'en dépit de la hauteur importante du domaine ($80a$), une organisation marquée soit persistante dans toute la suspension. Sur le graphe précédent, la valeur de e_{paroi} est alors fixée à $L_y/2$.

Ce résultat rappelle les simulations de Kulkarni et Morris (2009) et de Sierou et Brady (2002) qui – malgré l'absence de paroi – mettent en évidence une cristallisation de la suspension pour ϕ entre 0,5 et 0,55. Une structuration complète des particules apparaît vers $\phi \approx 0,5$ et perdure jusqu'à $\phi \approx 0,55$ avant que le système ne redevienne complètement désordonné à $\phi=0,6$. Ce comportement s'avère assez proche d'un système théorique de sphères dures monodisperses avec son point de congélation à $\phi_f \approx 0,49$.

Ainsi, nos résultats à $\phi_{bulk}=0,52$ et $\phi_{bulk}=0,55$ – c'est-à-dire une structuration complète même sur un très grand domaine – ne relèverait pas d'un ordre induit par les parois mais plutôt par l'écoulement. Les parois pourraient néanmoins promouvoir l'apparition d'un ordre dans la suspension. C'est en tout cas les conclusions de certaines simulations Monte-Carlo sur des systèmes de sphères dures montrant une cristallisation beaucoup plus rapide en présence de parois (Volkov *et al.*, 2002). Ces auteurs parlent ainsi de cristallisation induite, c'est-à-dire favorisée par l'existence d'un ordre déjà établi localement. Bien entendu, la considération d'une suspension monodisperse contribue grandement à cette cristallisation qui pourrait être limitée en simulant un système légèrement polydisperse.

Une fois la structuration développée en paroi, cette dernière ne semble pas dépendre de la taille du système. La même simulation à $\phi_{bulk}=0,4$ réalisée en domaine assez confiné ($L_y=20a$) ou, au contraire, assez grand ($L_y=60a$) fournit des résultats très proches comme le montre la Figure 10.5. Les petites différences visibles sont plus à rechercher du côté de la discrétisation en y pour le calcul de ce profil $\langle\phi(y)\rangle$. Cette indépendance de la taille de domaine L_y est également reportée par simulation (Yeo et Maxey, 2010b) et expérience (Eral *et al.*, 2009).

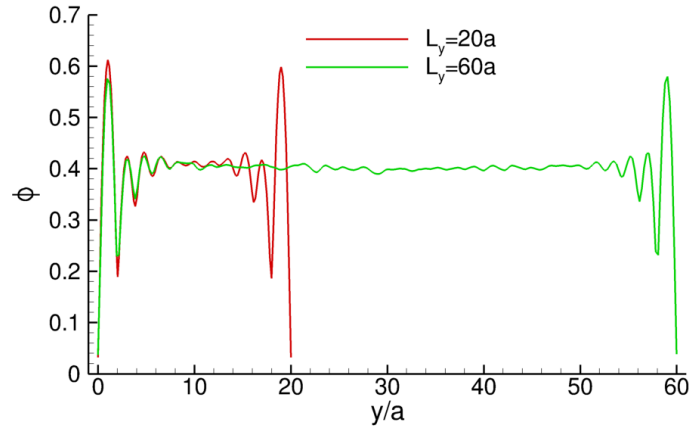


Fig. 10.5 – Profil de fraction volumique $\langle\phi(y)\rangle$ pour deux tailles de domaine ($\phi_{bulk}=0,4$; $\mu_d=0$).

Terminons cette partie en évaluant le rôle du frottement sur la structuration pariétale d'une suspension. Les résultats de la Fig. 10.6 présentent des profils de $\langle\phi(y)\rangle$ pour une suspension à $\phi_{bulk}=0,4$ et $L_y/a=20$ avec deux coefficients de frottement $\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$.

Si le profil conserve une forme similaire avec ses oscillations caractéristiques, ces dernières sont d'amplitude plus réduite dans le cas frottant. Ceci signifie que la formation de couches de particules est un peu moins marquée dans le cas frottant. Ce résultat confirme l'intuition : l'existence d'une force tangentielle de contact permet un échange de quantité de mouvement plus actif entre deux couches adjacentes et tend donc à les déstructurer. Ceci se note également au centre de la suspension où le profil de fraction est plus constant et avec des valeurs ϕ_{core} légèrement plus importantes.

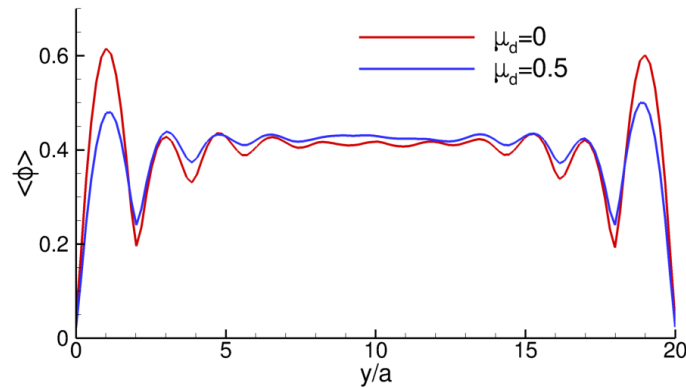


Fig. 10.6 – Profil de fraction volumique locale $\langle\phi(y)\rangle$ pour deux coefficients de frottement μ_d ($\phi_{bulk}=0,4$; $L_y/a=20$).

10.4 Vitesse

Comme pour la fraction volumique, il est possible d'étudier l'évolution de la vitesse de translation U des particules dans la suspension en utilisant une moyenne de phase particulaire

$$\langle U(y) \rangle = \frac{\langle \iint \chi(\mathbf{x}) U(\mathbf{x}) d\mathbf{x} dz \rangle}{\langle \iint \chi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} dz \rangle} \quad (10.1)$$

avec $U(\mathbf{x})$ la vitesse de translation du centre de la particule.

La Fig. 10.7 présente ce profil de vitesse de translation des particules (adimensionnée par la vitesse de paroi U_{paroi}) pour une suspension confinée à $L_y/a=20$ et $\phi_{bulk}=0,4$ pour deux coefficients de frottement $\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$.

Les deux profils sont assez semblables avec une zone linéaire dans le cœur de la suspension et un effet sensible des parois sur la vitesse locale. Du fait d'une structuration marquée, la vitesse des particules est quasi-constante au sein de chaque couche de particules d'où la présence de ces paliers de vitesse près des parois. Ce profil en escalier s'estompe à mesure que l'on s'éloigne des parois pour retrouver l'allure linéaire attendue. Dans la première couche, la vitesse des particules est proche de la vitesse de paroi U_{paroi} du fait des forces de lubrification. Elle n'y est toutefois pas exactement égale entre autres parce que la particule n'est pas en contact parfait avec la paroi du fait des rugosités. Rappelons en effet que la singularité de la force tangentielle de lubrification est en $\log \xi$ et ne prend donc des valeurs réellement importantes que pour des distances réduites ξ infiniment faibles. Comme pour la fraction volumique, l'effet du frottement est modéré et tend à lisser quelque peu les effets de la structuration sur l'écoulement.

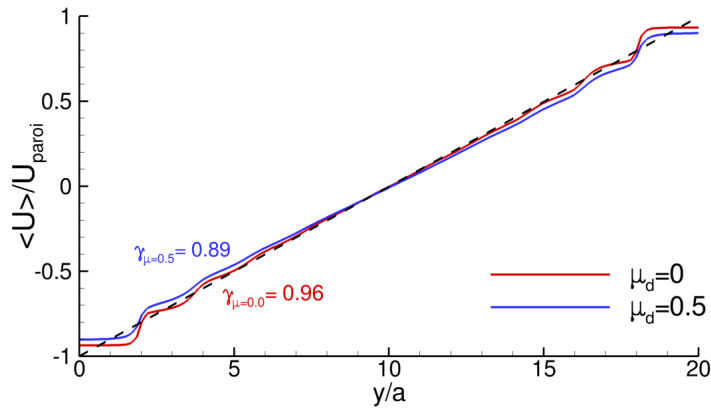


Fig. 10.7 – Profil de vitesse de phase particulaire $\langle U(y) \rangle / U_{paroi}$ pour deux coefficients de frottement μ_d ($\phi_{bulk}=0,4$; $L_y/a=20$). Le profil linéaire théorique est en pointillés.

Les vitesses $|U_{paroi} - \langle U(y) \rangle|$ aux parois sont respectivement de 0,06 et 0,10 dans les cas non-frottant et frottant. Elles ne sont donc pas nulles (présence de glissement), ni même égales à 0,05 ce qui serait la vitesse obtenue pour une particule roulant sans glissement sur la paroi ($a=0,1$ et $\Omega_z=-0,5$). Ces vitesses de glissement peuvent être comparées au modèle de glissement de Jana *et al.* (1995). Dans ce dernier, la vitesse de glissement u_e est exprimée par

$$u_e = \frac{\eta_r}{8} \dot{\gamma} a \quad (10.2)$$

L'application de cette relation avec nos résultats de viscosité à la fraction volumique de 0,4 (soit $\eta_r=6,0$ pour $\mu_d=0$ et $\eta_r=9,1$ pour $\mu_d=0,5$) fournit respectivement $u_e=0,07$ et $u_e=0,11$, ce qui est très proche des valeurs observées dans le calcul. Ce glissement conduit à un cisaillement apparent $\dot{\gamma}_{app}$ dans la suspension plus faible que celui imposé macroscopiquement $\dot{\gamma}_{bulk}=2U_{paroi}/L_y$ pris à 1 ici.

Il s'exprime alors par $\dot{\gamma}_{app} = 2(U_{paroi} - u_e)/L_y$ et, en reprenant les valeurs de u_e du modèle de Jana, conduit à $\dot{\gamma}_{app}=0,93$ et $0,89$ respectivement dans les cas non-frottant et frottant. Ces valeurs peuvent être comparées au cisaillement en cœur de suspension (ici entre $5a$ et $15a$) en calculant la pente du profil de vitesse dans cette région, soit $\dot{\gamma}_{core} = (d\langle U(y) \rangle / dy)_{5 \leq y/a \leq 15}$. Pour les cas non-frottant et frottant, une régression linéaire fournit $\dot{\gamma}_{core} \approx 0,96$ et $\dot{\gamma}_{core} \approx 0,89$, des valeurs assez proches de celles du modèle de Jana.

Une remarque précédente soulignait un possible lien entre la rugosité des particules et le glissement de la suspension dans le cas d'une paroi infiniment lisse. Il est possible de confirmer cette hypothèse en réalisant le même calcul (ici dans le cas non-frottant) mais en supprimant la rugosité avec les parois. Les particules restent toujours rugueuses mais cette rugosité est annulée dans le cas des interactions particule/paroi. Les particules peuvent donc s'approcher arbitrairement près des parois.

Les résultats obtenus sont représentés sur la Fig. 10.8. Comme attendu, la vitesse de la première couche de particules atteint maintenant quasiment celle de la paroi car la distance particule/paroi est beaucoup plus petite et, par conséquent, les forces de lubrification y sont plus intenses. Le cisaillement calculé au centre de la suspension $\dot{\gamma}_{core}$ vaut maintenant 1 et est donc égal au cisaillement imposé $\dot{\gamma}_{bulk}$: le glissement a disparu. Ces simulations montrent au final que pour une paroi lisse, la rugosité des particules peut conduire à un glissement de la suspension.

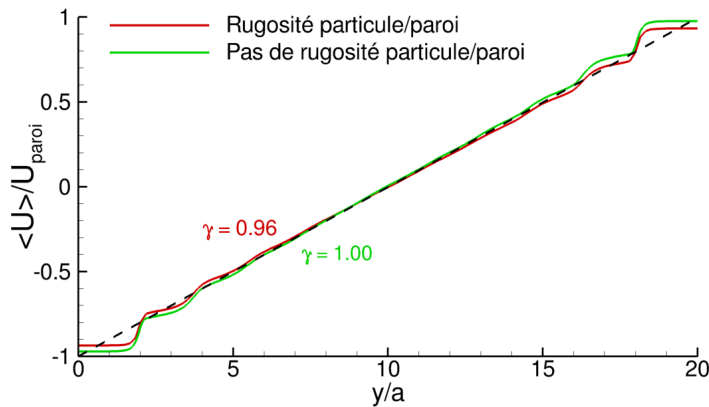


Fig. 10.8 – Profil de vitesse de phase particulaire $\langle U(y) \rangle / U_{paroi}$ avec et sans rugosités particule/paroi ($\phi_{bulk}=0,4$; $L_y/a=20$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$; $\mu_d=0$). Le profil linéaire théorique est en pointillés.

Abordons pour terminer les effets sur la vitesse de rotation Ω_z . En Fig. 10.9 est tracé le profil de $\langle \Omega_z(y) \rangle / \dot{\gamma}_{bulk}$ pour la même suspension ($L_y/a=20$ et $\phi_{bulk}=0,4$) et deux coefficients de frottement $\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$.

Au centre de l'écoulement, une valeur moyenne proche de l'attendu théorique à $-\dot{\gamma}_{bulk}/2$ est retrouvée. L'écart noté selon la présence ou non de frottement s'explique par la valeur différente de cisaillement local $\dot{\gamma}_{core}$. Dans les deux cas en effet, la valeur $\langle \Omega_z(y) \rangle / \dot{\gamma}_{core}$ au centre de la suspension est similaire, de l'ordre de $-0,54$. Les parois s'avèrent par contre jouer un rôle manifeste sur la rotation des particules. La force tangentielle de lubrification tend à limiter la rotation des particules ce qui explique une vitesse plus faible, particulièrement dans le cas non-frottant où la particule ne tourne plus qu'à la moitié de la vitesse qu'elle aurait en l'absence de paroi. Comme pour la vitesse de translation, la rugosité module la distance de séparation particule/paroi et donc l'intensité de la lubrification. La rotation en paroi est par contre accentuée par la présence de la force tangentielle de frottement qui impose un couple à la particule. Dans les deux cas (frottant et non-frottant), la particule roule sur la paroi avec glissement partiel car le rapport $|a\langle \Omega_z \rangle / (\langle U \rangle - U_{paroi})|$ calculé à la

paroi est inférieur à 1. Il vaut environ 0,4 et ce, indépendamment de la présence ou non de frottement. La valeur maximale de vitesse de rotation (environ $-0,7\dot{\gamma}_{bulk}$) est atteinte entre la première et la seconde couche, vers $y \approx 2,5a$.

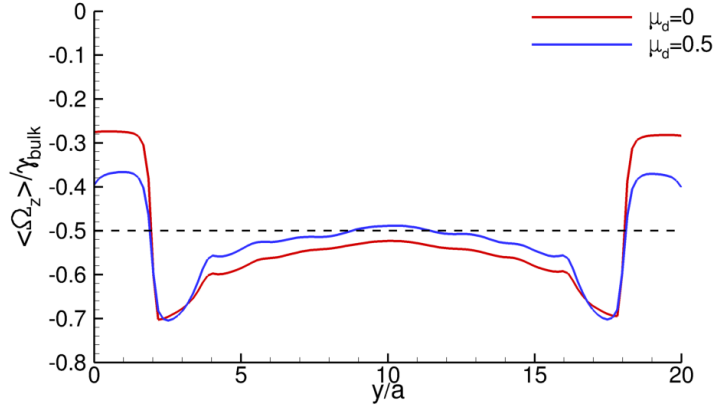


Fig. 10.9 – Profil de vitesse de rotation des particules $\langle \Omega_z(y) \rangle / \dot{\gamma}_{bulk}$ pour deux coefficients de frottement μ_d ($\phi_{bulk}=0,4$; $L_y/a=20$). La valeur moyenne $-\dot{\gamma}_{bulk}/2$ est représentée en pointillés.

10.5 Viscosité

D'un point de vue rhéologique, la structuration se caractérise par une thixotropie de la suspension avec des transitoires vers le régime stationnaire qui peuvent être assez longs. Il faut en effet plusieurs dizaines de $\dot{\gamma}^{-1}$ pour établir complètement la structure en paroi comme en témoigne la Fig. 10.10. Sur cette figure sont tracés simultanément la viscosité relative η_r (calculée dans tout le domaine) ainsi que le paramètre d'ordre Q_6 en fonction de la déformation $\dot{\gamma}t$ pour une suspension à $\phi_{bulk}=0,5$ et $L_y/a=20$. La configuration initiale (à $t=0$) est de type sphères dures aléatoires en équilibre.

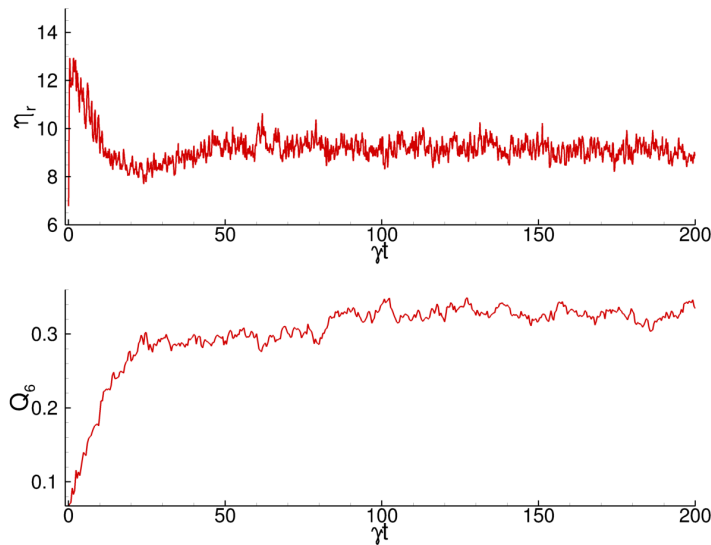


Fig. 10.10 – Viscosité relative η_r (calculée dans \mathcal{D}) et paramètre Q_6 en fonction de la déformation pour $\phi_{bulk}=0,5$ et $L_y/a=20$ ($\mu_d=0$).

Après une augmentation initiale de η_r quasi-instantanée de 7 vers 13, l'on note par la suite une diminution progressive de la viscosité associée à une augmentation de Q_6 et donc de l'ordre de la suspension. Les deux grandeurs se stabilisent ensuite après une déformation caractéristique d'environ 40. Cette valeur reste proche de celle d'approximativement 30 recensée dans une simulation similaire (Yeo et Maxey, 2010d). Ce temps est en tout cas très largement supérieur au temps caractéristique de déformation de la microstructure qui est inférieur à $\dot{\gamma}^{-1}$ pour cette configuration. Il correspond grossièrement au transitoire initial abrupt de η_r entre la microstructure de départ – isotrope – et une microstructure établie, anisotrope. La viscosité semble passer par un minimum qui n'est pas noté aux fractions volumiques plus faibles.

En régime établi, l'effet du confinement sur la viscosité relative dépend bien évidemment de la fraction volumique imposée ϕ_{bulk} . Les résultats de la Fig. 10.11 présentent l'évolution de la viscosité η_r (calculée sur toute la suspension) pour un confinement $L_y/a=20$ et deux coefficients de frottement.

Cette suspension a déjà été étudiée précédemment et nous savons que la structuration s'étend dans tout le domaine dès $\phi_{bulk}=0,45\sim 0,5$. C'est justement pour ces valeurs que la courbe $\eta_r(\phi_{bulk})$ semble montrer un point d'inflexion. Pour des fractions encore plus importantes ($\phi_{bulk}=0,55$), on note même une diminution de la viscosité. Ce comportement reste qualitativement semblable indépendamment de la présence ou non de frottement.

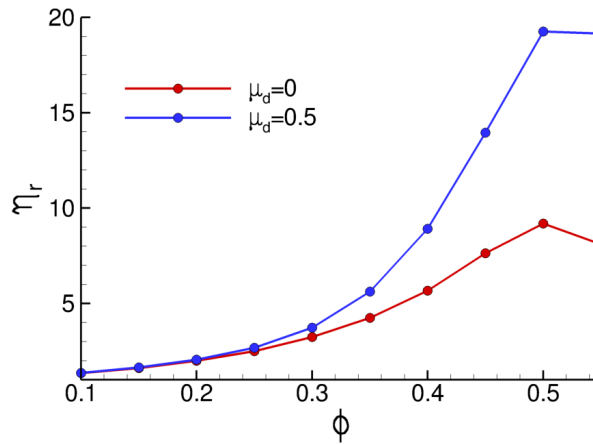


Fig. 10.11 – Viscosité relative η_r (calculée dans \mathcal{D}) en fonction de la fraction volumique pour une suspension à $L_y/a=20$ et deux coefficients de frottement.

Cette décroissance de la loi $\eta_r(\phi_{bulk})$ est également reportée dans d'autres simulations (Kulkarni et Morris, 2009; Yeo et Maxey, 2010d) et est directement liée à l'arrangement structuré des particules. Dans cette configuration en effet, le mouvement prédominant est un glissement entre couches adjacentes. Les vitesses relatives entre particules sont essentiellement tangentielles et les interactions de lubrification sont donc plus faibles car en $\log \xi$, au contraire de vitesses relatives normales qui induiraient des forces de lubrification en ξ^{-1} . Par conséquent, une structuration importante diminue fortement les interactions de lubrification et la dissipation associée. De surcroît, la contribution du contact à la viscosité diminue elle aussi dans ce cas. Comme nous le verrons un peu plus tard, les contacts se font alors principalement entre couches de particules, donc selon l'axe \mathbf{e}_y , ce qui tend à diminuer la composante Σ_{xy}^c .

A l'inverse, il est instructif d'étudier l'évolution de la viscosité à une fraction volumique donnée mais en faisant varier le confinement L_y/a . Sur la Fig. 10.12 est présentée la viscosité relative $\eta_{r,tot}$ calculée sur toute la suspension dans un cas non-frottant et à $\phi_{bulk}=0,4$ (courbe rouge).

La viscosité montre une décroissance avec la hauteur L_y , surtout pour les L_y faibles. Au-delà de $L_y/a \geq 40$, la viscosité n'évolue quasiment plus. Ces résultats contrastent avec les simulations de Yeo et Maxey (2010b) qui prédisent quant à elles une augmentation de la viscosité avec L_y (mais une valeur asymptotique atteinte également pour $L_y/a \approx 40$). Comme les interactions de lubrification particule/paroi sur le stresslet ne sont pas prises en compte dans ces travaux, nous postulons que cela puisse contribuer à ces écarts.

Plusieurs effets sont susceptibles d'expliquer cette évolution de la viscosité avec L_y/a , en particulier les variations de fraction volumique dans la suspension, le glissement ou la structuration. Sur la Fig. 10.12 est également présentée en vert la viscosité estimée en considérant la loi $\eta_r(\phi)$ calculée numériquement (Fig. 10.11) mais à la fraction volumique ϕ_{core} du centre de la suspension. L'évolution de cette grandeur est très proche de la viscosité $\eta_{r,tot}$, sauf pour le point à $L_y/a=10$. Ceci tend à montrer que la diminution de $\eta_{r,tot}$ est ici en grande partie liée à la variation de la fraction volumique dans la suspension. A mesure que le domaine s'étend, la proportion relative de la zone homogène augmente tandis que ϕ_{core} tend vers la valeur $\phi_{bulk}=0,4$. Pour un confinement de $L_y/a = 20$ par exemple, cette valeur ϕ_{core} est de l'ordre de 0,409. Ces conclusions ne s'appliquent pas au cas $L_y/a=10$: pour ce confinement et cette fraction volumique, l'écoulement est très structuré sur toute la hauteur et il n'existe plus de cœur homogène. Notons que les études paramétriques de Yeo et Maxey (2010d) montrent également que la loi globale $\eta_r=f(\phi, L_y)$ est assez complexe.

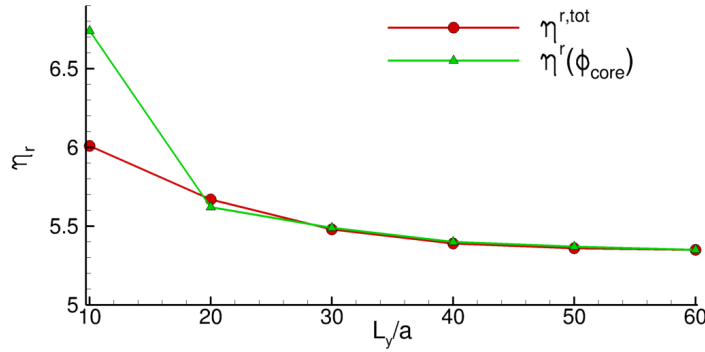


Fig. 10.12 – Viscosité relative $\eta_{r,tot}$ (calculée dans \mathcal{D}) et $\eta_r(\phi)$ estimé à ϕ_{core} en fonction de L_y/a ($\phi_{bulk}=0,4$; $\mu_d=0$).

La simulation donne également accès à l'évolution spatiale des grandeurs rhéologiques de phase particulaire. Nous présentons en Fig. 10.13 les profils des contraintes $\langle \Sigma_{xy}^p(y) \rangle$, $\langle \Sigma_{xy}^h(y) \rangle$ et $\langle \Sigma_{xy}^c(y) \rangle$ (adimensionnées par $\eta\dot{\gamma}$) dans une suspension à $\phi_{bulk}=0,4$ et $L_y/a=20$. L'opérateur de moyenne de phase particulaire est identique à celui utilisé précédemment, soit comme dans Eq. (10.1).

Considérons en premier lieu le cas non-frottant (Fig. 10.13(a)). Comme attendu, les contraintes sont quasiment constantes au centre de la suspension. Le maximum de contrainte particulaire Σ_{xy}^p (et donc η_r) est atteint entre la première et la deuxième couche, en $y \approx 2a$. Il résulte d'une contrainte hydrodynamique encore élevée et de l'augmentation de la contrainte de contact. Dans la première couche ($0 \leq y \leq 2a$), cette contrainte hydrodynamique reste importante du fait de l'interaction particule/paroi. Par contre, la contrainte de contact y est très faible car les forces de contact sont principalement dans la direction y en non-frottant d'où une quasi-absence de contribution sur la composante xy .

Le frottement ne modifie pas fondamentalement les conclusions précédentes (Fig. 10.13(b)). Bien entendu, les niveaux des contraintes de contact sont plus élevés dans le centre de la suspension, un point déjà abordé sur le rôle du frottement. Le pic de contrainte à l'interface des deux premières couches est désormais presque masqué par l'augmentation importante des contraintes pour les par-

ticules en paroi. Celle-ci est en grande partie imputable à la force tangentielle de frottement à la paroi qui induit donc une contribution de contact sur la composante xy . La contrainte hydrodynamique en proche paroi est également un peu plus élevée.

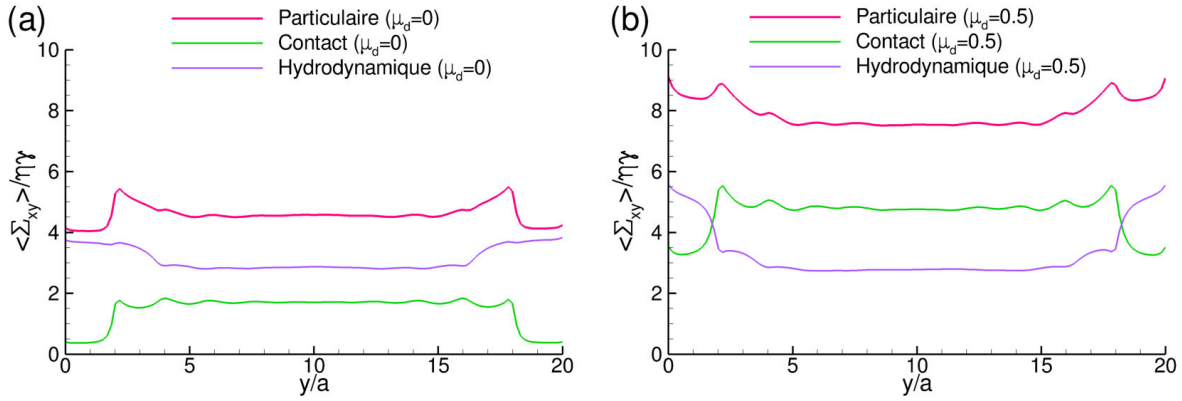


Fig. 10.13 – Profil de contrainte particulaire $\langle \Sigma_{xy}^p(y) \rangle / \eta \dot{\gamma}$, hydrodynamique $\langle \Sigma_{xy}^h(y) \rangle / \eta \dot{\gamma}$ et de contact $\langle \Sigma_{xy}^c(y) \rangle / \eta \dot{\gamma}$ pour deux coefficients de frottement $\mu_d=0$ (a) et $\mu_d=0,5$ (b) ($\phi_{bulk}=0,4$ et $L_y/a=20$).

Au final, les profils de $\langle \Sigma_{xy}^p(y) \rangle$ et $\langle \Sigma_{xy}^c(y) \rangle$ restent relativement homogènes pour cette suspension à $L_y/a=20$. Par conséquent, la viscosité relative « totale » $\eta_{r,tot}$ calculée sur l'ensemble de la suspension (dans \mathcal{D}) devrait rester proche de la viscosité relative $\eta_{r,core}$ estimée à cœur (dans \mathcal{D}_{core} , pour y entre $5a$ et $15a$) et caractéristique d'une suspension homogène.

La Fig. 10.14 trace le ratio $\eta_{r,tot}/\eta_{r,core}$ en fonction de la fraction volumique pour le cas non-frottant et frottant. Ce rapport reste autour de 1, ce qui confirme l'assertion précédente pour toutes les fractions testées et ce, indépendamment de la présence de frottement.

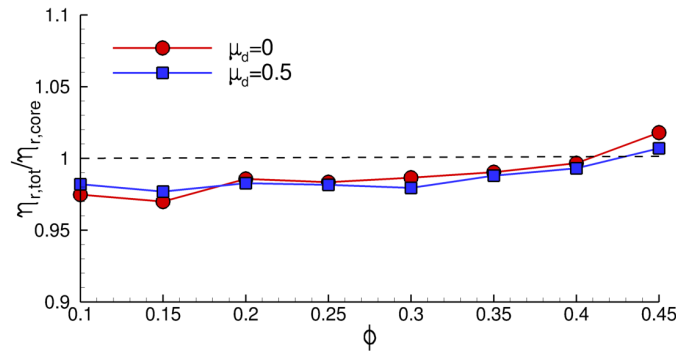


Fig. 10.14 – Rapport des viscosités relatives $\eta_{r,tot}/\eta_{r,core}$ en fonction de la fraction volumique et pour deux coefficients de frottement à $L_y/a=20$. La viscosité $\eta_{r,tot}$ est calculée sur toute la suspension et $\eta_{r,core}$ seulement au centre.

10.6 Différences de contraintes normales

L'exercice précédent a également été étendu aux différences de contraintes normales N_1 et N_2 . L'évolution spatiale de $\langle N_1(y) \rangle$ et $\langle N_1^c(y) \rangle$ (adimensionnés par $\eta \dot{\gamma}$) est présentée en Fig. 10.15 pour les cas frottant et non-frottant, toujours à $\phi_{bulk}=0,4$ et $L_y/a=20$.

Contrairement à la viscosité, nous observons cette fois un effet local des parois particulièrement

important qui va jusqu'à modifier le signe même de la première différence de contraintes normales. D'une valeur au centre de la suspension d'environ -1 (celle typiquement obtenue pour une suspension homogène), nous passons à des valeurs près des parois de +1 voire même +3 en présence de frottement. Si au centre, la composante de contact est très faible ($\langle N_1^c \rangle \ll \langle N_1 \rangle$), ce n'est plus le cas près des parois où l'on a sensiblement $\langle N_1 \rangle \approx \langle N_1^c \rangle$. Les forces de contact sont donc responsables de cet effet local des parois sur N_1 .

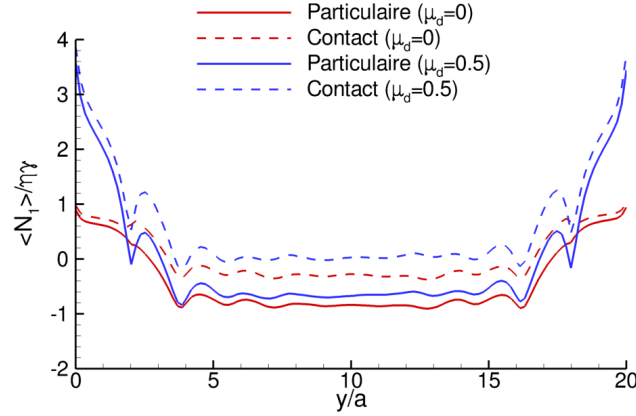


Fig. 10.15 – Profil de $\langle N_1(y) \rangle / \eta \dot{\gamma}$ (traits pleins) et $\langle N_1^c(y) \rangle / \eta \dot{\gamma}$ (traits pointillés) pour deux coefficients de frottement μ_d ($\phi_{bulk}=0,4$ et $L_y/a=20$).

Afin de mieux comprendre les résultats précédents, la Fig. 10.16 présente les profils moyennés des contraintes de contact $\langle \Sigma_{xx}^c(y) \rangle$ et $\langle \Sigma_{yy}^c(y) \rangle$ pour cette suspension. Ces graphes montrent que $\langle \Sigma_{xx}^c \rangle \approx \langle \Sigma_{yy}^c \rangle$ au centre de la suspension d'où un $\langle N_1^c \rangle$ très faible dans cette région. Ce résultat avait déjà été établi précédemment lors de l'étude du rôle du frottement sur une suspension homogène. Près des parois au contraire, les simulations prédisent une réduction assez forte de $|\langle \Sigma_{xx}^c \rangle|$ alors que $|\langle \Sigma_{yy}^c \rangle|$ conserve des valeurs sensiblement proches de celles d'une suspension homogène (ceci est surtout vrai dans le cas non-frottant ; on note une légère augmentation dans le cas frottant). Les forces de contact dans la direction y ont donc assez peu changé et les parois agissent surtout en diminuant ces forces dans la direction x . Les particules s'organisent en couches au sein desquelles la vitesse est relativement constante : les particules se suivent en interagissant donc peu dans la direction de la vitesse d'où la réduction de $|\langle \Sigma_{xx}^c \rangle|$. De ce fait, N_1^c peut localement changer de signe comme sur les résultats obtenus en Fig. 10.15.

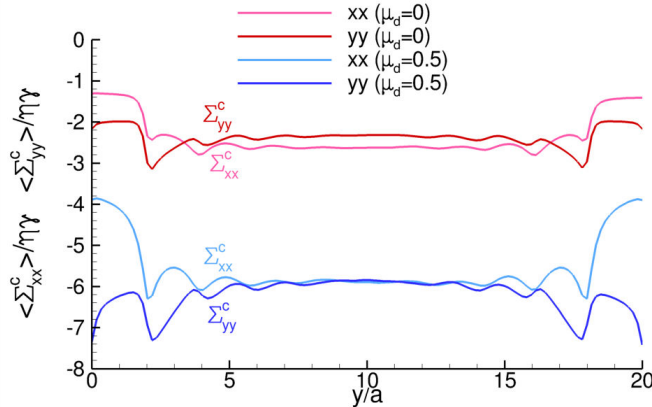


Fig. 10.16 – Profil des contraintes $\langle \Sigma_{xx}^c(y) \rangle / \eta \dot{\gamma}$ et $\langle \Sigma_{yy}^c(y) \rangle / \eta \dot{\gamma}$ pour deux coefficients de frottement μ_d ($\phi_{bulk}=0,4$ et $L_y/a=20$).

Les parois ont donc un rôle crucial sur N_1 et il va de ce fait exister une différence importante entre le $N_{1,tot}$, calculé sur la totalité de la suspension confinée, et le $N_{1,core}$ estimé en cœur de suspension comme le montre la Fig. 10.17 qui trace le rapport de ces deux quantités. Celui-ci est toujours inférieur à 1, ce qui signifie que la valeur $|N_{1,tot}|$ calculée pour une suspension confinée est systématiquement plus faible que celle qu'aurait une suspension homogène ($N_{1,core}$). La différence croît avec la fraction volumique et la présence de frottement et l'effet des parois n'est sensible que pour les fractions volumiques supérieures à 0,2. Pour ce confinement ($L_y/a=20$), le $N_{1,tot}$ de la suspension confinée pour $\phi_{bulk}=0,45$ devient quasi-nul en non-frottant et change même de signe (et donc devient positif) en frottant. Ce résultat est peut-être à rapprocher de certaines données expérimentales attestant d'un N_1 quasi-nul ou négatif. A propos du rôle du frottement, nous avons souligné que celui-ci entraînait une réduction de N_1 mais qui n'était pas suffisante pour expliquer ces résultats expérimentaux. Il est possible que l'action combinée du frottement et des parois soit par contre en mesure d'aider à comprendre ces effets. Dans le chapitre suivant, nous nous proposons de superposer nos résultats avec ces données expérimentales.

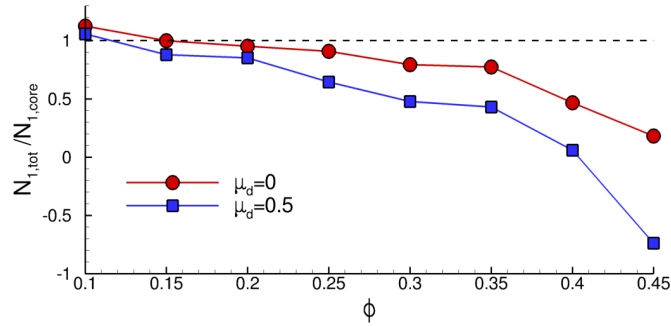


Fig. 10.17 – Rapport $N_{1,tot}/N_{1,core}$ en fonction de la fraction volumique et pour deux coefficients de frottement ($L_y/a=20$). La valeur de $N_{1,tot}$ est calculée sur toute la suspension et $N_{1,core}$ seulement au centre.

Concernant la seconde différence de contraintes normales, son profil est représenté en Fig. 10.18. Les courbes en pointillés (contraintes de contact) sont quasiment superposées aux traits pleins (contraintes totales), signe que dans toute la suspension, N_2 correspond à N_2^c et que par conséquent la contribution hydrodynamique N_2^h est quasi-nulle. Cette spécificité avait été mentionnée auparavant mais seulement sur la valeur moyenne : ces résultats montrent que cela reste valable en tout point de la suspension.

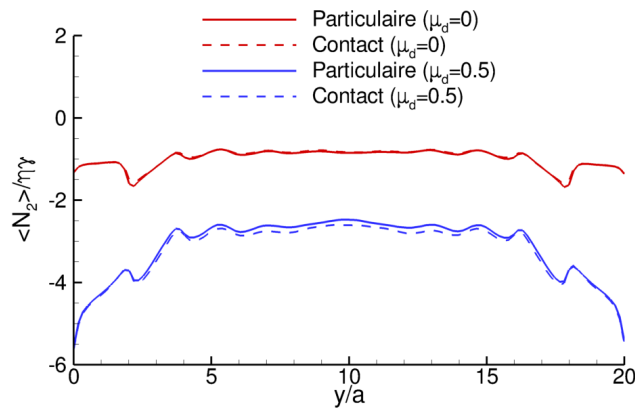


Fig. 10.18 – Profil de $\langle N_2(y) \rangle / \eta \dot{\gamma}$ (traits pleins) et $\langle N_2^c(y) \rangle / \eta \dot{\gamma}$ (traits pointillés) pour deux coefficients de frottement μ_d ($\phi_{bulk}=0,4$ et $L_y/a=20$).

Dans le cas non-frottant, la différence N_2 reste relativement homogène dans toute la suspension alors que dans le cas frottant, une augmentation notable de $|N_2|$ est notée en proche paroi. Il s'agit encore une fois du rôle des forces de contact et plus particulièrement d'une diminution de $|\Sigma_{zz}^c|$ pour les mêmes raisons que celles expliquant l'effet similaire sur $|\Sigma_{xx}^c|$ (structuration impliquant une diminution des interactions en z).

Contrairement à N_1 , les profils de N_2 restent globalement homogènes au sein de la suspension, surtout dans le cas non-frottant, et N_2 ne change pas de signe. En conséquence, la différence $N_{2,tot}$ calculée sur la suspension confinée est du même ordre de grandeur que la valeur $N_{2,core}$ obtenue pour une suspension homogène comme le montre la Fig. 10.19. Le ratio $N_{2,tot}/N_{2,core}$ reste aux alentours de l'unité sauf aux plus fortes fractions volumiques où la mesure de N_2 dans toute la suspension est supérieure d'environ 30 à 40 % à celle d'une suspension non-confinée.

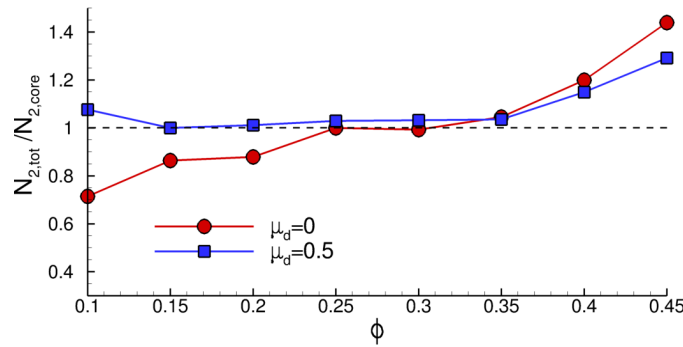


Fig. 10.19 – Rapport $N_{2,tot}/N_{2,core}$ en fonction de la fraction volumique et pour deux coefficients de frottement ($L_y/a=20$). La valeur de $N_{2,tot}$ est calculée sur toute la suspension et $N_{2,core}$ seulement au centre.

Terminons par une digression sur la pertinence physique des valeurs locales, qui n'ont que le sens que leur confère la moyenne employée. Pour une grandeur particulière Ψ^i associée à la particule i (et qui représente une contrainte, une vitesse,...), la moyenne utilisée dans ce travail sur le confinement est définie par

$$\langle \Psi(y) \rangle = \frac{\langle \iint \chi^i(\mathbf{x}) \Psi^i d\mathbf{x} dz \rangle}{\langle \iint \chi^i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} dz \rangle} \quad (10.3)$$

où $\chi^i(\mathbf{x})$ est la fonction indicatrice liée à la particule i .

Notons que les grandeurs rhéologiques moyennes issues des simulations sont plutôt estimées par des moyennes d'ensemble mais nous avons vérifié que cette moyenne d'ensemble commute bien avec la moyenne volumique sur les particules ainsi qu'avec la moyenne surfacique dans les directions homogènes, soit (avec N_p le nombre de particules) :

$$\bar{\Psi} = \sum_{i=1}^{N_p} \Psi^i = \frac{N_p}{L_x L_y L_z} \frac{\langle \iiint \chi^i(\mathbf{x}) \Psi^i d\mathbf{x} dy dz \rangle}{\phi_{bulk}} = \frac{N_p}{L_x L_z} \frac{\langle \iint \chi^i(\mathbf{x}) \Psi^i d\mathbf{x} dz \rangle}{\phi_{bulk}} \quad (10.4)$$

La moyenne Eq. (10.3) utilisée dans notre étude est une moyenne surfacique dans les deux directions homogènes. Le dénominateur normalise par la fraction volumique locale $\langle \phi(y) \rangle$ (car $\langle \iint \chi^i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} dz \rangle = L_x L_z \langle \phi(y) \rangle$) et permet donc d'étudier un comportement intrinsèque indépendamment de la quantité de particules (moyenne de phase particulière). Cependant, la moyenne de $\langle \Psi(y) \rangle$ sur y ne redonne pas la moyenne volumique (ou d'ensemble) $\bar{\Psi}$ puisque

$$\int \frac{\iint \chi^i(\mathbf{x}) \Psi^i d\mathbf{x} dz}{\langle \phi(y) \rangle} dy \neq \frac{\iiint \chi^i(\mathbf{x}) \Psi^i d\mathbf{x} dy dz}{\phi_{bulk}} \quad (10.5)$$

Tous les profils $\langle \Psi(y) \rangle$ présentés précédemment peuvent donc s'avérer trompeurs : l'effet des parois sur la valeur moyenne est plus modeste que ne le laisserait supposer une simple moyenne du profil de $\langle \Psi(y) \rangle$. Signalons enfin que le choix de la moyenne est arbitraire et qu'une autre moyenne aurait fourni des profils différents. La formulation utilisée Eq. (10.3) a tendance à lisser les profils car la grandeur Ψ^i est affectée à tout le volume physique de la particule via $\chi^i(\mathbf{x})$. Elle peut donc avoir tendance à gommer les variations rapides ayant lieu sur moins d'un rayon.

10.7 Lien avec les mesures

Une des motivations de nos travaux sur le rôle du frottement était de mieux comprendre l'origine des grandes dispersions expérimentales sur N_1 ainsi que l'écart entre ces mesures et les simulations numériques existantes (sans frottement). La prise en compte des forces de frottement conduit à une réduction sensible de $|N_1|$ et permet d'accorder – dans une certaine mesure – simulations et expériences. La relative sensibilité au coefficient de frottement peut également contribuer à des dispersions selon la nature des particules utilisées

Toutefois, le frottement seul ne peut expliquer l'extrême disparité des résultats, surtout sur N_1 . En particulier, les mesures de Couturier *et al.* (2011) et Dbouk *et al.* (2013) reportent des N_1 respectivement nuls et positifs. Nos précédents résultats montrent que le N_1 calculé dans une suspension modérément confinée ($L_y/a=20$) conduit, en présence de frottement, à des valeurs positives de N_1 . Ainsi, l'action conjointe du frottement et des parois pourrait expliquer ces résultats expérimentaux.

La Fig. 10.20 reprend les résultats expérimentaux de Couturier *et al.* (2011) et Dbouk *et al.* (2013) avec nos prédictions de différences de contraintes normales dans le cas frottant ($\mu_d=0,5$). Nous présentons les valeurs totales $N_{1,tot}$, c'est-à-dire obtenues sur l'ensemble de la suspension, ainsi que les valeurs à cœur $N_{1,core}$ pour servir de comparaison.

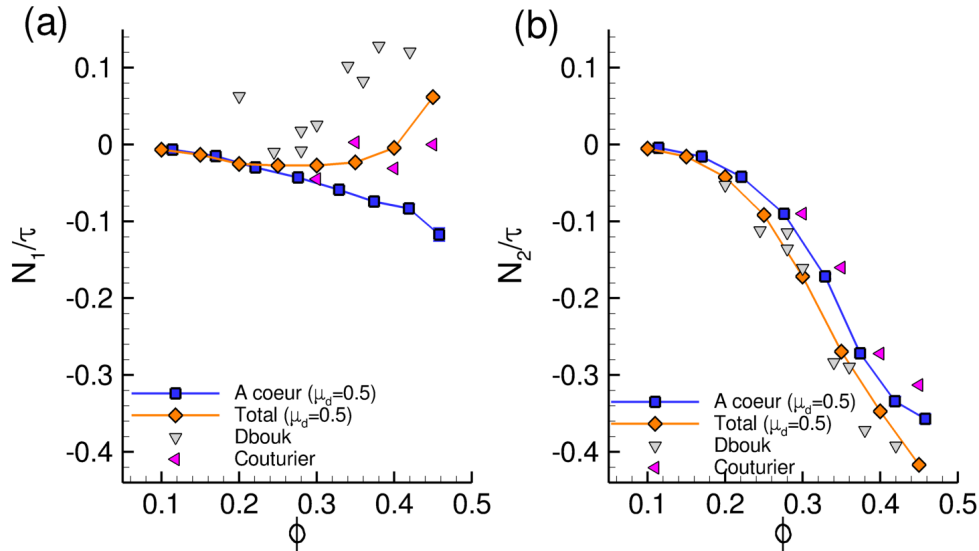


Fig. 10.20 – Différences de contraintes normales N_1/τ (a) et N_2/τ (b) en fonction de la fraction volumique pour $\mu_d=0,5$ et comparaisons avec les mesures (Couturier *et al.*, 2011; Dbouk *et al.*, 2013). Ces grandeurs sont estimées sur toute la suspension ($N_{1,tot}$, en orange) ou juste au cœur ($N_{1,core}$, en bleu). Le confinement vaut $L_y/a=20$.

Comme attendu, la valeur de N_1 change de signe pour une concentration suffisante (de l'ordre de $\phi \approx 0,4$) et devient nettement positive au-delà. L'accord avec les mesures de Couturier *et al.* (2011) est

correct mais il reste néanmoins toujours difficile de recoller aux expériences de Dbouk *et al.* (2013). L'effet sur N_2 est sans surprise relativement limité et ne modifie pas la corrélation déjà satisfaisante sans prise en compte des parois.

Nous concluons que bien que les parois et le frottement permettent théoriquement d'obtenir des N_1 positifs, il reste difficile de prédire parfaitement les comportements observés dans les expériences de Dbouk *et al.* (2013). Bien évidemment, les résultats de simulation présentés dépendent du confinement et nous n'avons ici considéré que le cas $L_y/a=20$. Cette valeur est cependant proche de celle utilisée dans les expériences de Dbouk *et al.* (2013) telles que présentées en Fig. 10.20 ($L_y/a \approx 27$). Cependant, des expériences complémentaires avec un confinement nettement moins important ($L_y/a \approx 100$) mènent à des résultats similaires sur N_1 alors que l'on s'attendrait à des valeurs se rapprochant d'une suspension homogène (courbes bleues, sur la Fig. 10.20).

Une hypothèse est alors que les expériences – qui s'appuient sur une mesure de Σ_{yy} à la paroi – seraient plutôt représentatives d'un état rhéologique de la suspension en proche paroi. Comme cet état reste inchangé quelle que soit la taille L_y du domaine (voir Fig. 10.5), ceci expliquerait que les résultats soient indépendants du confinement.

PERCOLATION D'AMAS DANS LES SUSPENSIONS

Sommaire

11.1 Objectifs	189
11.2 Taille des amas	190
11.3 Percolation d'amas	193
11.4 Seuil de percolation	194
11.5 Quelques caractéristiques des amas percolants	196
11.6 Lois d'échelle et exposants critiques	200
11.7 Accord avec la théorie de De Gennes	203
11.8 Lien avec la rhéologie	204

11.1 Objectifs

Dès leur début, les simulations numériques de suspensions ont mis en évidence la formation d'amas de particules, s'agencant principalement selon l'axe de compression. La taille de ces amas augmente avec la fraction volumique et ils peuvent éventuellement s'étendre à travers tout le domaine : on parle alors d'amas percolants. Un amas percolant forme donc un réseau de particules connectées entre elles de part et d'autre du domaine.

Cette percolation peut conduire à des effets macroscopiques notables (chaînes de force en mécanique, transition isolant/conducteur pour la conductivité,...) et il apparaît donc important de mieux la comprendre et la prédire. D'un point de vue rhéologique, l'apparition d'amas percolants est susceptible d'engendrer une augmentation importante de la viscosité (Chang et Powell, 1993; Lefebvre, 2007b; Singh et Nott, 2000).

Le seuil de percolation, c'est-à-dire la fraction volumique critique ϕ_{cr} pour laquelle un amas percolant apparaît, a été reporté dans quelques simulations – principalement en 2D monocouche par SD. Les valeurs sont relativement dispersées et s'étalent entre 0,25 et 0,40 (Chang et Powell, 1993; Meunier et Bossis, 2008; Phung *et al.*, 1996).

A notre connaissance, il n'existe pas d'étude entièrement dédiée à la percolation dans les suspensions. L'objectif de ce travail est d'utiliser la simulation pour mieux comprendre les conditions d'apparition de la percolation (fraction critique) ainsi qu'étudier certaines caractéristiques de ces amas percolants. Nous aborderons en particulier le lien entre rhéologie et percolation afin d'en préciser la nature. Enfin, nous évaluerons dans quelle mesure nos résultats cadrent avec la théorie standard de la percolation. Cela sera également l'occasion de vérifier la pertinence des conjectures de De Gennes sur ce point (De Gennes, 1979).

D'un point de vue pratique, toutes les simulations de ce chapitre sont réalisées sur un temps d'environ $100\dot{\gamma}^{-1}$ une fois un régime établi obtenu (i.e., en écartant le transitoire initial). La configuration instantanée des particules est stockée tous les $0,01\dot{\gamma}^{-1}$: nous disposons ainsi d'environ 10^4 configurations qui peuvent par la suite être étudiées à loisir.

Concernant le domaine de simulation, nous évaluerons différentes hauteurs L_y . La longueur L_x (dans la direction de la vitesse) sera choisie égale ou supérieure à L_y : l'idée est ici de pouvoir entièrement capter un amas dans le domaine de calcul dans le cas où celui-ci est orienté selon l'axe de compression à 135° . La taille L_z dans la direction de la vorticit   sera maintenue    $L_z=20a$. Ainsi, pour $L_y=60a$ (la plus grande hauteur test  e), le domaine de calcul est relativement imposant, de taille $60a \times 60a \times 20a$.    $\phi_{bulk}=0,45$, cela conduit    environ $N_p \approx 7500$ particules.

Les concepts li  s    la percolation (statistiques d'amas, effets de taille finie, seuils de percolation, etc.) pourront   tre trouv  s dans des ouvrages de r  f  rence comme Torquato (2002).

11.2 Taille des amas

Les amas sont d  finis comme un ensemble de particules connect  es entre elles. Du fait de la rugosit   de ces particules, il s'agit ici de contacts directs. Pour chaque configuration instantan  e, les amas sont d  tect  s et il est ainsi possible d'en sp  cifier leur nombre, leur taille ou toute autre caract  ristique. La distribution de taille d'amas n_k est d  finie par

$$n_k = \frac{N_{amas}(k)}{N_p} \quad (11.1)$$

o   $N_{amas}(k)$ repr  sente le nombre d'amas exactement constitu  s de k particules (appel  s aussi k -m  res) et N_p est le nombre de particules. Il en d  coule la probabilit   s_k qu'une particule donn  e appartienne    un k -m  re :

$$s_k = kn_k \quad \text{avec} \quad \sum_k s_k = 1 \quad (11.2)$$

Cette derni  re distribution permet de calculer la taille moyenne d'amas $\langle S \rangle$ d  finie par

$$\langle S \rangle = \sum_k ks_k = \sum_k k^2 n_k \quad (11.3)$$

La Fig. 11.1 trace la r  partition s_k pour une suspension    $\phi_{bulk}=0,35$ et $L_y=20a$ dans le cas frottant et non-frottant. Le nombre total de particules vaut ici $N_p=970$. Il existe une probabilit     lev  e dans ces conditions de trouver des particules isol  es (monom  res) ou des amas de petite taille (k faibles). La probabilit   qu'une particule appartienne    un amas de taille k importante est beaucoup plus   lev  e dans le cas frottant que dans le cas non-frottant. Il appar   t en effet que s_k est nul pour $k \gtrsim 200$ en non-frottant alors qu'une particule frottante poss  de une probabilit   non nulle d'appartenir    un amas ayant plus de 300 particules.

Ces r  sultats sugg  rent que la taille moyenne $\langle S \rangle$ des amas est plus importante en frottant qu'en non-frottant. Ceci s'av  re v  rifi   pour d'autres fractions volumiques comme le montre la Fig. 11.2. Au-del   de $\phi_{bulk} \approx 0,25 \sim 0,3$ (seuil typique au-del   duquel les effets du frottement se font ressentir, voir §9), les amas form  s pour des particules frottantes sont syst  matiquement plus gros que pour des particules non-frottantes. L'  cart de taille peut   tre marqu   avec un facteur quelquefois sup  rieur    5 pour la gamme de fraction volumique interm  diaire.    $\phi_{bulk}=0,4$, la taille moyenne $\langle S \rangle$ est de 530 particules dans le cas frottant, soit la moiti   de la suspension, et seulement environ 150 en non-frottant. Au sein de cet amas, les particules interagissent toutes fortement entre elles par le contact mais aussi par la lubrification. Notons que l'augmentation de la taille moyenne des amas avec le frottement avait d  j     t   mise en   vidence dans des simulations SD monocouche de Wilson et Davis (2002).

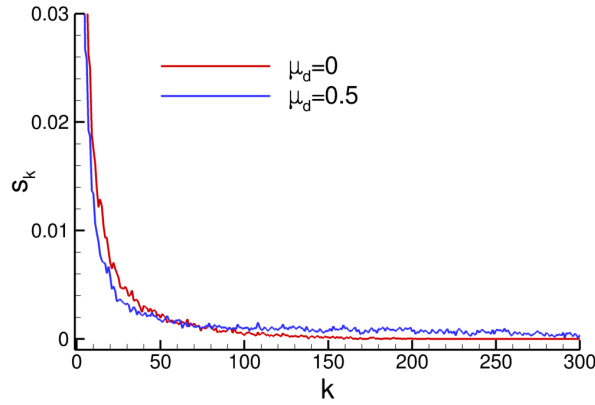


Fig. 11.1 – Distribution s_k dans le cas frottant ($\mu_d=0,5$) et non-frottant ($\mu_d=0$) pour une suspension à $\phi_{bulk}=0,35$ et $L_y=20a$. La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

En régime dilué, la taille moyenne des amas est très petite avec une prédominance de particules isolées (environ 75 % à $\phi_{bulk}=0,2$). Elle augmente ensuite très nettement à partir d'une fraction de l'ordre de 0,3~0,35. Pour les fractions volumiques les plus élevées, on a $\langle S \rangle \rightarrow N_p$ (970 ici) : dans ce cas, il n'y aurait plus qu'un seul amas regroupant toutes les particules de la suspension.

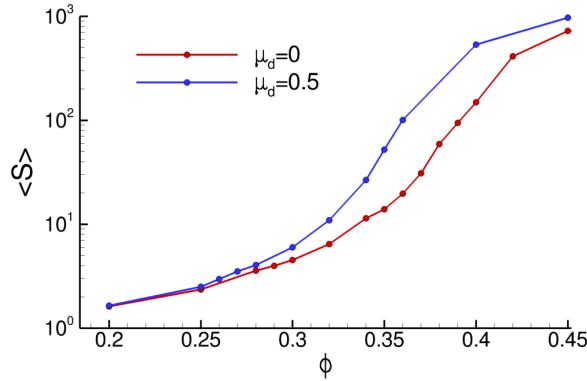


Fig. 11.2 – Taille moyenne d'amas $\langle S \rangle$ en fonction de la fraction volumique en frottant ($\mu_d=0,5$) et non-frottant ($\mu_d=0$) pour une suspension à $L_y=20a$. La rugosité réduite vaut $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

Outre le frottement, la rugosité des particules pourrait également jouer un rôle sur la taille des amas. La taille moyenne $\langle S \rangle$ en fonction de la fraction volumique est présentée pour trois rugosités en Fig. 11.3 dans le cas non-frottant. En sus des résultats précédents à $\xi_{rug}=5.10^{-3}$, deux autres rugosités ont été évaluées, à savoir $\xi_{rug} = 10^{-3}$ et $\xi_{rug} = 10^{-2}$, ce qui balaye la gamme usuelle des rugosités expérimentales (Smart et Leighton, 1989).

La Fig. 11.3(a) présente les résultats classiquement en fonction de la fraction volumique ϕ_{bulk} et l'on note un effet sensible des rugosités avec une taille d'amas qui croît avec ξ_{rug} . Les écarts restent limités comparés au rôle du frottement.

L'explication la plus intuitive est que la présence de rugosités de plus grande taille augmente les chances de contact et donne lieu à des amas plus importants. Cet effet devrait donc être gommé si l'on trace les résultats en fonction d'une fraction équivalente prenant en compte ce volume exclu. Comme les particules rugueuses sont en contact quand leur distance est inférieure à $a\xi_{rug}$, cela correspond à considérer des particules de rayon équivalent $a' = a(1 + \xi_{rug}/2)$. La fraction équivalente vaut ainsi

$\phi'_{bulk} = \phi_{bulk}(a'/a)^3 \approx \phi_{bulk}(1 + 3\xi_{rug}/2)$. Les résultats de la Fig. 11.3(b) sont représentés en fonction de cette fraction équivalente mais montrent que les trois courbes ne se superposent pas. Les tailles de rugosité considérées sont trop faibles pour faire évoluer significativement la fraction volumique équivalente. Les rugosités n'agissent donc pas uniquement par un effet purement géométrique mais modifient également l'écoulement de la suspension.

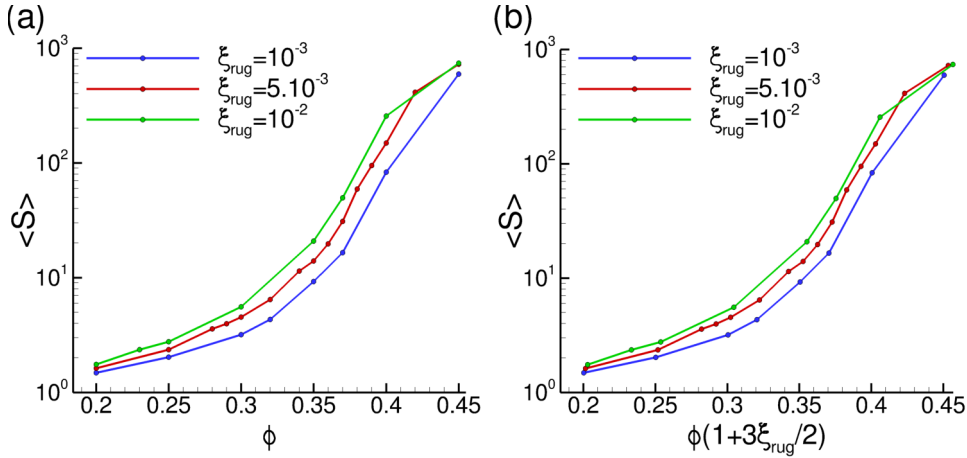


Fig. 11.3 – Taille moyenne d'amas $\langle S \rangle$ en fonction de la fraction volumique ϕ_{bulk} (a) et de la fraction équivalente $\phi'_{bulk} = \phi_{bulk}(1 + 3\xi_{rug}/2)$ dans le cas non-frottant ($\mu_d=0$) pour trois rugosités réduites ξ_{rug} pour une suspension à $L_y=20a$.

Il a été spécifié que pour les fractions volumiques très élevées, il n'y a plus qu'un seul amas soit $\langle S \rangle \rightarrow N_p$. Cette remarque suggère que $\langle S \rangle$ est lié au nombre de particules et dépend donc de la taille du système, ce qui en ferait une grandeur peu pertinente. Cette dépendance à N_p est en fait imputable à la taille finie du système et ne se manifeste que pour les fractions importantes quand les amas ont des longueurs de corrélation de l'ordre de la taille de la suspension. La Fig. 11.4 présente ainsi cette évolution de $\langle S \rangle$ pour les quatre tailles L_y de suspension testées. Pour les fractions volumiques jusque vers 0,4, les quatre courbes sont quasiment confondues, ce qui montre que $\langle S \rangle$ est intrinsèque à la structure de la suspension indépendamment de sa taille. Ce n'est plus le cas pour les fractions plus élevées où cette taille de système joue directement $\langle S \rangle \propto N_p$.

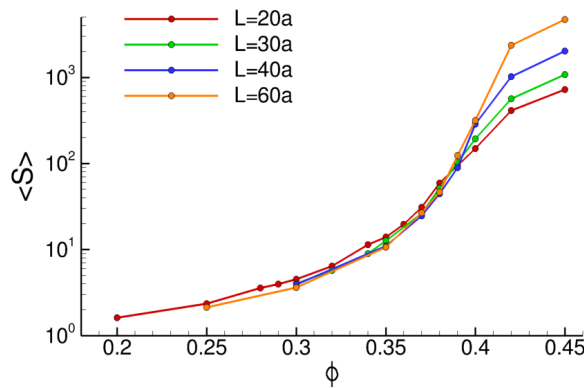


Fig. 11.4 – Taille moyenne d'amas $\langle S \rangle$ en fonction de la fraction volumique ϕ_{bulk} pour différentes tailles de domaine L_y ($\mu_d=0$; $\xi_{rug}=5 \cdot 10^{-3}$).

11.3 Percolation d'amas

Un amas est qualifié de percolant s'il est en contact à la fois avec la paroi supérieure et inférieure. Il s'agit plus précisément d'une percolation dans la direction y du gradient de vitesse.

Un exemple d'un tel amas percolant est présenté en Fig. 11.5 (où les particules n'appartenant pas à l'amas ne sont pas représentées pour des raisons de clarté). Cet amas forme donc un ensemble de particules entièrement connectées (par contact direct) qui s'étend sur toute la hauteur L_y et est en contact simultanément avec les deux parois imposant le cisaillement. Sa structure est filamentaire et implique assez peu de particules. Il est globalement orienté dans une direction proche de l'axe de compression et montre une structure embranchée (fourche) dans sa partie inférieure.

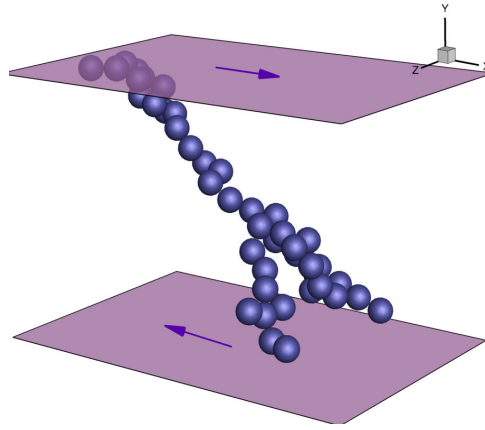


Fig. 11.5 – Un exemple d'amas percolant ($\phi_{bulk}=0,32$; $\mu_d=0$; $L_y=20a$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$). Les particules hors amas ne sont pas représentées.

Pour étudier quantitativement la percolation, il est nécessaire de recourir à des grandeurs pertinentes. Une quantité naturelle est la fonction indicatrice de percolation χ_{perc} qui vaut 1 quand, à un instant donné, il existe au moins un amas percolant et 0 sinon. La moyenne temporelle $\langle \chi_{perc} \rangle$ vaudra 0 lorsqu'aucune percolation n'est détectée dans la suspension et 1 quand existe une percolation permanente (i.e., à chaque instant la suspension contient au moins un amas percolant). Entre ces deux cas extrêmes, une valeur de $\langle \chi_{perc} \rangle$ intermédiaire quantifiera une présence transitoire de percolation car les amas se créent et se détruisent sous l'effet du cisaillement et des interactions hydrodynamiques. Cette quantité $\langle \chi_{perc} \rangle$ est analogue à une probabilité de percolation.

Une dernière grandeur assez intuitive et un peu plus utilisée dans les suspensions (De Gennes, 1979; Mills et Snabre, 2009) est la fraction moyenne $\langle f_{perc} \rangle$ de particules appartenant à l'amas percolant. Cette grandeur atteint 1 quand toutes les particules font partie d'amas percolants.

La Fig. 11.6 présente l'évolution de ces deux grandeurs en fonction de la fraction volumique pour une suspension à $L_y/a=20$ avec des particules non-frottantes de rugosité $\xi_{rug}=5.10^{-3}$. Ces deux courbes montrent des profils similaires avec des valeurs nulles pour des fractions volumiques faibles puis une évolution très rapide vers 0,35. La valeur de $\langle \chi_{perc} \rangle$ vaut 1 dès $\phi_{bulk} \approx 0,4$. Au-delà de cette valeur, il existe donc un réseau percolant en permanence. Il est intéressant de souligner que ce seuil est largement inférieur à la valeur ϕ_{rlp} du réseau connecté le plus lâche, de l'ordre de $\phi_{rlp} \approx 0,50-0,55$. Cette dernière valeur est quelquefois également utilisée pour les suspensions (Coussot et Ancy, 1999a; Mills et Snabre, 2009) mais nos travaux montrent donc que ce choix n'est peut-être pas pertinent.

Même aux fractions élevées, la valeur de $\langle f_{perc} \rangle$ reste inférieure à 1. Malgré une percolation permanente, l'amas percolant ne contient pas toutes les particules de la suspension, seulement environ 70 % à $\phi_{bulk}=0,45$. Au-delà, la structuration en couches (bien développée à cette fraction

et ce confinement) tend même à réduire la taille de l'amas percolant.

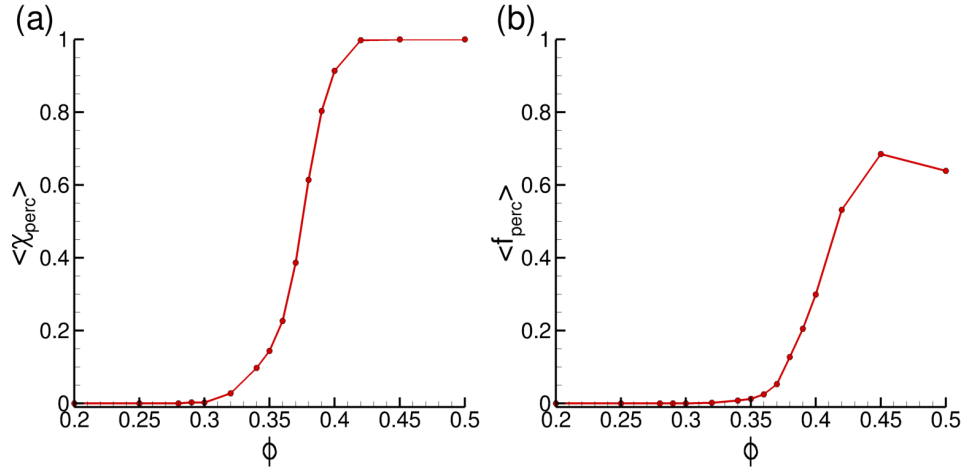


Fig. 11.6 – Evolution de $\langle \chi_{perc} \rangle$ (a) et $\langle f_{perc} \rangle$ (b) avec la fraction volumique pour une suspension à $L_y/a=20$; $\mu_d=0$ et $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

Ces grandeurs permettent de préciser le seuil critique de percolation ϕ_{cr} , seuil au-delà duquel apparaissent les premiers amas percolants, et défini formellement par

$$\phi_{cr} = \sup\{\phi : \langle \chi_{perc}(\phi) \rangle = 0\} \quad (11.4)$$

Les deux quantités $\langle \chi_{perc} \rangle$ et $\langle f_{perc} \rangle$ sont bien entendu équivalentes pour la détermination du seuil via Eq. (11.4) car elles prennent leurs premières valeurs non-nulles à la même fraction.

Pour le cas présenté ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$ et $\xi_{rug}=5.10^{-3}$), ce seuil vaut $\phi_{cr} \approx 0,285 \pm 0,005$ (i.e., présence de percolation à $\phi_{bulk}=0,29$ mais absence à $\phi_{bulk}=0,28$).

11.4 Seuil de percolation

En utilisant la définition précédente Eq. (11.4), il est possible d'estimer le seuil de percolation ϕ_{cr} pour les différentes simulations réalisées. Comme dans tout processus décrit par une théorie de percolation, il existe des effets de taille finie avec un impact marqué de la taille L du système sur les courbes $\langle \chi_{perc}(\phi) \rangle$ ainsi que sur le seuil ϕ_{cr} . Vu la configuration de calcul, cette taille L de système est identifiée à la hauteur L_y .

Ces effets sont illustrés sur la Fig. 11.7 qui reporte les résultats de simulation en termes de $\langle \chi_{perc}(\phi) \rangle$ pour différentes tailles de domaine $L=L_y$. Ce type d'allure est cohérent avec ce qui est attendu en théorie de la percolation. Quand la taille du système diminue, les paramètres d'ordre (comme $\langle \chi_{perc} \rangle$) ont une évolution plus continue et la zone de transition non-percolant/percolant est plus étendue. Le seuil de percolation ϕ_{cr}^L pour un système de taille L tend également à diminuer. Ce seuil pour $L=20a$ était de $\phi_{cr}^L \approx 0,285$ mais il augmente à près de 0,38 dans le plus grand domaine considéré à $L=60a$. Les seuils de percolation obtenus pour les différents domaines simulés sont consignés en Tab. 11.1

Le seuil de percolation ϕ_{cr}^L dépend de la taille L de la suspension considérée et s'échelonne globalement – pour les domaines étudiés – entre 0,3 et 0,4. Ces valeurs sont en cohérence avec les quelques résultats numériques de la littérature (entre 0,25 et 0,4 selon les calculs). Expérimentalement, une étude de Blanc *et al.* (1983) sur une suspension bidimensionnelle a permis d'estimer un seuil surfacique d'environ 0,68 équivalent à une fraction volumique critique de l'ordre de 0,45.

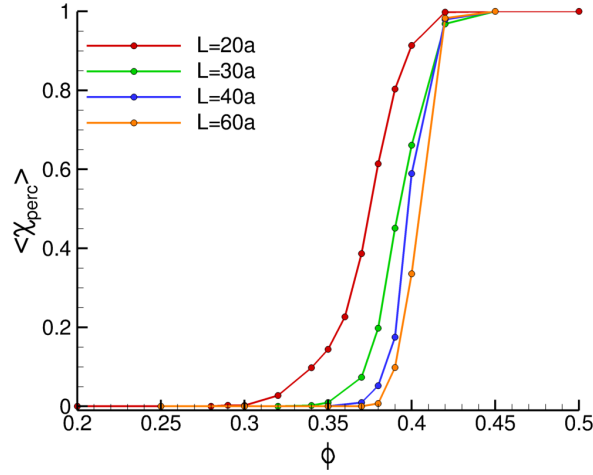


Fig. 11.7 – Evolution de $\langle \chi_{perc} \rangle$ en fonction de la fraction volumique pour différentes tailles de domaine L ($\mu_d=0$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$).

L/a	ϕ_{cr}^L
20	$0,285 \pm 0,005$
30	$0,330 \pm 0,010$
40	$0,360 \pm 0,010$
60	$0,375 \pm 0,005$

Tab. 11.1 – Seuil de percolation ϕ_{cr}^L en fonction de la taille L du domaine ($\mu_d=0$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$).

Il est également possible d'estimer à partir de ces données le seuil de percolation ϕ_{cr}^∞ qui serait obtenu dans la limite d'un domaine infiniment grand. Des résultats théoriques de percolation stipulent que les courbes $B(\phi) = \langle S \rangle L^{-3} \langle \chi_{perc} \rangle^{-2}$ pour les différentes tailles L ont un point d'intersection à $\phi = \phi_{cr}^\infty$ (Vink, 2012). L'application de cette méthode fournit l'évaluation $\phi_{cr}^\infty \approx 0,399$.

Le rôle du frottement sur le seuil de percolation a également été étudié et la Fig. 11.8 trace l'évolution de $\langle \chi_{perc}(\phi) \rangle$ pour deux coefficients de frottement $\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$. Les simulations montrent qu'une percolation des amas se développe à des fractions plus faibles en présence de frottement. Ceci est cohérent avec les résultats précédents montrant que les amas sont plus gros lorsqu'il y a frottement entre particules. Les simulations de Seto *et al.* (2013) mènent également à la conclusion similaire que le frottement tend à promouvoir la percolation du réseau de particules (sans pour autant la quantifier). Le seuil de percolation en frottant est fourni en Tab. 11.2.

μ_d	ϕ_{cr}^L
0	$0,285 \pm 0,005$
0,5	$0,255 \pm 0,005$

Tab. 11.2 – Seuil de percolation ϕ_{cr}^L pour deux coefficients de frottement ($L/a=20$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$).

Terminons enfin par une évaluation du rôle des rugosités sur le seuil de percolation. La Fig. 11.9 présente l'évolution de $\langle \chi_{perc}(\phi) \rangle$ pour trois rugosités réduites ξ_{rug} dans le cas non-frottant. L'effet des rugosités est assez manifeste avec une percolation plus précoce dans le cas de particules rugueuses et retardée pour des particules plus lisses. Comme pour la taille des amas, des consid-

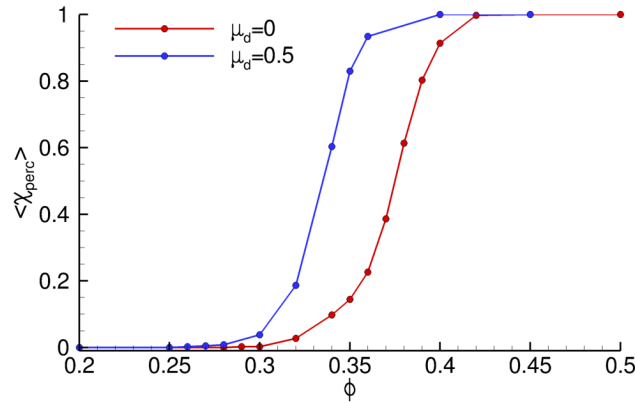


Fig. 11.8 – Evolution de $\langle \chi_{perc} \rangle$ en fonction de la fraction volumique pour deux coefficients de frottement $\mu_d=0$ et $\mu_d=0,5$ ($L_y/a=20$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$).

érations purement stériques ne sont pas en mesure d'expliquer un effet aussi prononcé et le même graphe tracé en fraction volumique équivalente ϕ'_{bulk} comme dans Fig. 11.3 ne permettrait pas une superposition des trois courbes. Il s'agit donc probablement d'un effet lié à une microstructure différente de la suspension selon la rugosité mais ce point reste à approfondir. Les seuils obtenus sont présentés en Tab. 11.3.

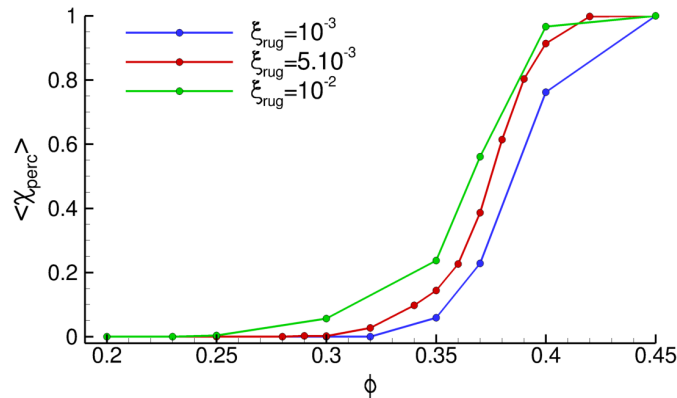


Fig. 11.9 – Evolution de $\langle \chi_{perc} \rangle$ en fonction de la fraction volumique pour trois rugosités réduites ξ_{rug} ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$).

ξ_{rug}	ϕ_{cr}^L
10^{-3}	$0,335 \pm 0,015$
5.10^{-3}	$0,285 \pm 0,005$
10^{-2}	$0,240 \pm 0,010$

Tab. 11.3 – Seuil de percolation ϕ_{cr}^L en fonction de la rugosité réduite ($L/a=20$; $\mu_d=0$).

11.5 Quelques caractéristiques des amas percolants

La simulation permet également de fournir des informations pertinentes et quantitatives sur la géométrie ou l'apparition de ces amas percolants.

Caractéristiques géométriques

Concernant la géométrie, la visualisation d'un amas percolant (Fig. 11.5) a permis d'en dresser un premier « portrait-robot » avec une structure étirée, plutôt linéaire et globalement orientée selon un axe proche de l'axe de compression.

Nous avons tenté de quantifier cette orientation privilégiée en calculant, au sein de chaque amas percolant, la moyenne de l'angle θ (dans le plan $x - y$) liant chaque particule en contact (revoir le schéma Fig. 9.8 pour la définition de cet angle). La valeur moyenne obtenue est de l'ordre de $\langle \theta \rangle \approx 120^\circ$ et ce, quelle que soit la fraction volumique. Les structures percolantes semblent donc toujours globalement s'orienter dans une direction proche de l'axe de compression de l'écoulement à 135° . Le frottement et la rugosité ne modifient quasiment pas cette valeur moyenne.

Un exemple de distribution de l'angle θ entre particules de l'amas percolant est présenté en Fig. 11.10 pour une suspension non-frottante à $\phi_{bulk}=0,35$. Sans grande surprise, l'évolution obtenue rappelle très fortement celle de la fonction de corrélation de paire au contact observée lors de l'étude sur le frottement (Fig. 9.9) avec une zone de déplétion marquée dans la zone d'extension ($0^\circ < \theta < 90^\circ$) et, au contraire, une surconcentration de contacts dans la zone de compression ($90^\circ < \theta < 180^\circ$). L'anisotropie de la structure percolante ne reflète donc au final que l'anisotropie même de la microstructure de la suspension. Comme pour cette dernière, il n'y a pas de pic net sur l'axe de compression à $\theta=135^\circ$ mais plutôt une distribution relativement uniforme dans toute la région de compression.

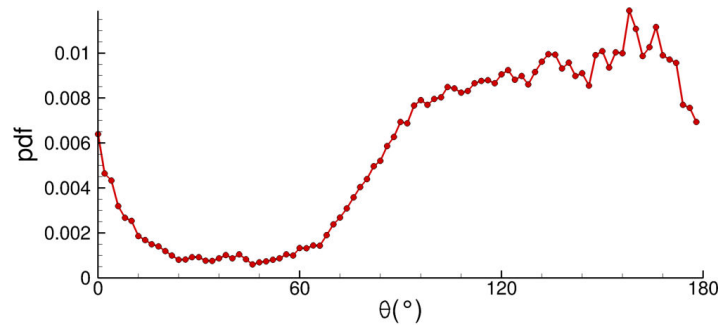


Fig. 11.10 – Distribution de l'angle θ d'orientation des contacts dans les amas percolants ($\phi_{bulk}=0,35$; $L_y/a=20$; $\mu_d=0$). L'angle θ est calculé dans le plan $x - y$ et compté positif à partir de \mathbf{e}_x .

La structure plutôt linéaire de l'amas peut être confirmée en calculant le nombre de coordination (ou coordinence) $\langle Z \rangle$, c'est-à-dire le nombre moyen de contacts par particule. La figure suivante (Fig. 11.11) trace l'évolution de $\langle Z \rangle$ en fonction de la fraction volumique, soit dans les amas percolants (courbe verte), soit dans toute la suspension. Dans ce dernier cas, on considère soit toutes les particules (courbe rouge), soit seulement les particules effectivement en contact (en écartant donc les monomères, appelés aussi particules flottantes).

Concernant les amas percolants, la coordinence moyenne est relativement constante, de l'ordre de 2. Chaque particule constituant un amas percolant est donc – en moyenne – en contact avec deux voisines seulement. Cette valeur est donc plutôt représentative d'une structure filamentaire, cohérente avec la visualisation de la Fig. 11.5. A faible fraction volumique, il est possible d'avoir $\langle Z \rangle < 2$ du fait des quelques particules, principalement situées aux parois, n'étant rattachées à l'amas que par un seul contact. Le nombre de particule total diminuant avec la fraction volumique, le poids relatif de ce type de contact à la coordinence moyenne est donc plus important aux fractions faibles.

Pour l'ensemble de la suspension, le nombre de coordination moyen $\langle Z \rangle$ augmente quasi-

linéairement avec ϕ . Il reste somme toute relativement faible et même en régime concentré, le nombre moyen de contacts dans une suspension n'excède pas 2. La diminution notable de $\langle Z \rangle$ lorsque l'on écarte les particules flottantes (i.e., sans contact), et qui est ici matérialisée par la différence entre les courbes rouge et orange, montre que les particules isolées restent assez nombreuses dans une suspension même à forte concentration. A $\phi_{bulk}=0,4$, cette fraction de particules flottantes est encore de 25 % (20 % avec frottement). Ces caractéristiques contrastent avec les milieux granulaires où la coordinence est plus élevée ($4 \lesssim \langle Z \rangle \lesssim 6$) et la fraction de particules flottantes plus faible ($\lesssim 10\%$) (Roux *et al.*, 2007).

Terminons par signaler que la coordinence instantanée maximale recensée dans nos simulations est $Z=8$.

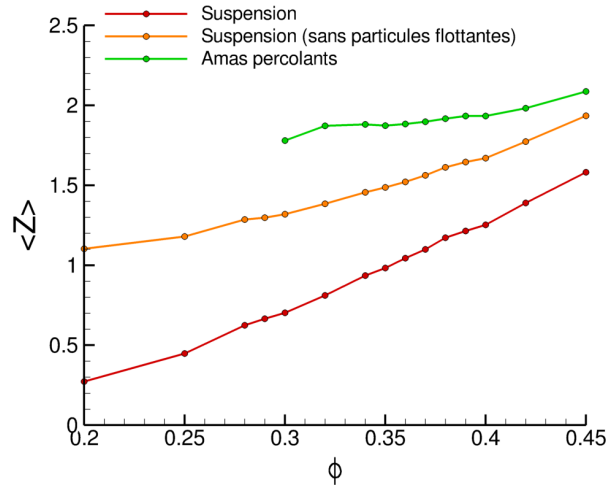


Fig. 11.11 – Nombre de coordination $\langle Z \rangle$ en fonction de la fraction volumique : dans les amas percolants (en vert) et dans toute la suspension (courbe rouge : toutes les particules ; courbe orange : hors particules flottantes). Les résultats sont obtenus pour $L_y/a=20$, $\mu_d=0$ et $\xi_{rug}=5.10^{-3}$.

Nombre d'amas percolants

Une autre des propriétés des amas percolants est leur nombre. La question est de savoir s'il apparaît un unique amas percolant dans la suspension ou, au contraire, s'ils sont multiples. En réalité, il existe une certaine gamme de fraction volumique pour laquelle il peut coexister plusieurs amas, jusqu'à trois (pour $L_y=20a$). Le nombre moyen d'amas percolants $\langle N_{perc} \rangle$ dans la suspension est tracé sur la Fig. 11.12. Les résultats présentés sont obtenus pour une configuration $L_x=30a$ et $L_z=L_y=20a$; ce nombre d'amas est susceptible de varier avec la taille du domaine de calcul.

Proche du seuil de percolation, il n'y a en moyenne qu'un seul amas percolant comportant peu de particules ; de même à forte fraction volumique où il n'existe également qu'un unique gros amas percolant (mais qui ne contient pas toutes les particules comme nous l'avons vu). Entre ces deux régimes extrêmes, il existe quelques épisodes où plusieurs amas percolants – le plus souvent deux – se développent simultanément dans la suspension, ce qui conduit à une valeur moyenne $\langle N_{perc} \rangle$ supérieure à 1. Il est bien entendu nécessaire que la fraction volumique ne soit pas trop élevée afin que ces amas restent suffisamment petits pour ne pas fusionner en un seul amas plus gros.

La Fig. 11.13 représente une telle configuration instantanée où deux amas percolent simultanément, à la fraction $\phi_{bulk}=0,34$. Ces deux amas ne sont pas en contact. Dans le cas d'amas multiples, ces derniers se suivent dans la direction de la vitesse (comme dans la Fig. 11.13) ou évoluent côte à

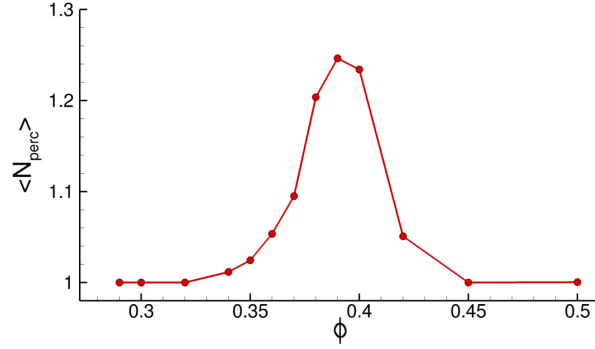


Fig. 11.12 – Nombre moyen d'amas percolants $\langle N_{perc} \rangle$ en fonction de la fraction volumique ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$).

côte (dans la direction de la vorticité).

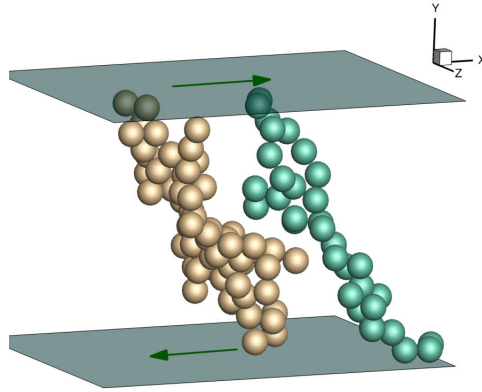


Fig. 11.13 – Un exemple d'amas percolants « jumeaux » à $\phi_{bulk}=0,34$ ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$). Les particules hors amas ne sont pas représentées. Ces deux amas percolent mais ne sont pas en contact.

Caractéristiques temporelles

Il est également instructif d'étudier la dynamique d'apparition de cette percolation car il s'avère que proche du seuil de percolation, ces amas percolants sont particulièrement fugaces avec des temps d'existence très courts. A partir de l'évolution temporelle de $\chi_{perc}(t)$, il est possible d'estimer un temps caractéristique de percolation $\langle \tau_{perc} \rangle$ comme un temps moyen pendant lequel une percolation existe. De la même manière, nous évaluons un temps moyen d'apparition $\langle \tau_{app} \rangle$, soit le temps de latence moyen entre deux occurrences de percolation dans la suspension. Ces deux grandeurs sont présentées pour $L_y/a=20$ en Fig. 11.14, adimensionnées par le temps caractéristique de l'écoulement $\dot{\gamma}^{-1}$.

En régime de percolation « naissante » (soit juste au-dessus du seuil ϕ_{cr}^L), la durée moyenne d'existence de la percolation reste très faible, de l'ordre de $0,1\dot{\gamma}^{-1}$ (rappelons que la période d'échantillonnage des configurations est de $0,01\dot{\gamma}^{-1}$). Curieusement, ce caractère fortement transitoire perdure jusqu'à des valeurs assez élevées de fraction. Même à $\phi_{bulk}=0,4$ où l'on a pourtant percolation 90 % du temps ($\langle \chi_{perc} \rangle \approx 0,9$), ce temps moyen n'est que d'environ $0,5\dot{\gamma}^{-1}$. Par la suite, $\langle \tau_{perc} \rangle$ diverge brutalement puisqu'il y a percolation permanente ($\langle \tau_{perc} \rangle \rightarrow \infty$), vers $\phi_{bulk} \approx 0,42$ pour $L_y/a=20$.

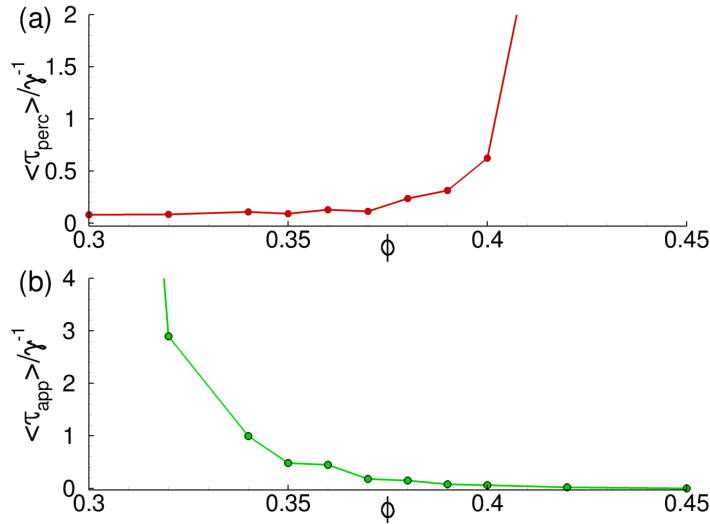


Fig. 11.14 – Temps moyen de percolation $\langle \tau_{perc} \rangle$ (a) et temps d'apparition moyen $\langle \tau_{app} \rangle$ (b) en fonction de la fraction volumique ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$).

Ainsi, les amas percolants se défont et se refont constamment, sous l'effet du cisaillement et des forces hydrodynamiques, et n'existent toujours que de manière très transitoire avant d'atteindre un réseau connecté permanent.

Le temps d'« attente » moyen entre deux épisodes percolants possède quant à lui une allure différente avec une valeur infinie en ϕ_{cr}^L puis une décroissance régulière avec une loi puissance $\langle \tau_{app} \rangle \propto (\phi - \phi_{cr}^L)^\delta$ avec $\delta \approx -3,1$. Ainsi, les amas percolants ont toujours quasiment la même « espérance de vie » mais apparaissent juste avec une fréquence plus élevée lorsque la concentration augmente.

11.6 Lois d'échelle et exposants critiques

La théorie de la percolation cherche à décrire les structures topologiques liées aux connections au sein d'un système aléatoire. Prenons l'exemple d'une percolation de site, c'est-à-dire un réseau dans lequel une certaine fraction p des sites est active. Le schéma Fig. 11.15 représente l'évolution d'un tel réseau pour trois fractions p différentes. A partir de $p \approx 0,6$, il y a apparition d'un amas percolant (en noir) puisque l'on dépasse alors légèrement le seuil critique de percolation ($p_{cr}=0,593$ pour un réseau carré de sites en 2D). Pour un réseau infini, cet amas percolant est infini et les amas non percolants sont appelés amas finis.

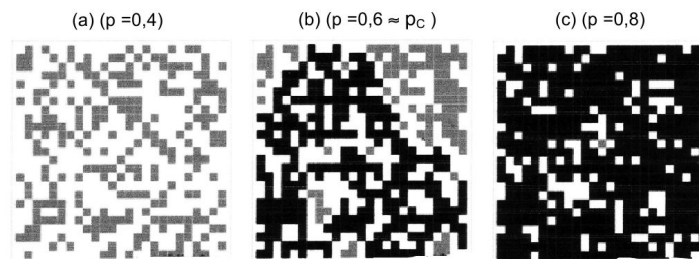


Fig. 11.15 – Exemple de percolation de site sur un réseau carré 25×25 pour trois fractions de sites p (Mély, 2011). L'amas en noir est percolant.

La théorie de la percolation propose des lois – dites lois d'échelle – permettant de quantifier l'évolution de certaines grandeurs près du seuil p_{cr} . En particulier, la probabilité de percolation P

(probabilité d'appartenir à l'amas percolant), les tailles moyennes d'amas $\langle S \rangle$ et les longueurs de corrélation des amas ξ_{corr} suivent les lois suivantes (Torquato, 2002)

$$P \propto (p - p_{cr})^\beta, \quad p \rightarrow p_{cr}^+ \quad (11.5)$$

$$\langle S \rangle \propto |p_{cr} - p|^{-\gamma}, \quad p \rightarrow p_{cr} \quad (11.6)$$

$$\xi_{corr} \propto |p_{cr} - p|^{-\nu}, \quad p \rightarrow p_{cr} \quad (11.7)$$

La relation pour P n'est valide que pour $p \rightarrow p_{cr}^+$, car elle n'est pas définie pour $p < p_{cr}$ ($P=0$). Les expressions pour $\langle S \rangle$ et ξ_{corr} sont, elles, définies partout (sauf en $p=p_{cr}$). Pour $p > p_{cr}$, il faut alors comprendre ces relations applicables pour les amas finis. Ainsi, quand $p > p_{cr}$, la taille et la longueur de corrélation des amas finis diminuent.

Les lois exactes sont fonctions du système ou du type de percolation (sites, liens,...) mais pas les exposants β , γ et ν qui sont censés être universels (exposants critiques). Ces derniers ne dépendent donc pas de la structure du réseau ou de ses détails microscopiques mais uniquement de la dimension du problème (ici, $d=3$). Cette percolation standard est dite isotrope car il n'y a aucune direction privilégiée. D'autres types de percolation (percolation dirigée, percolation d'invasion,...) montrent au contraire des directions préférentielles (Havlin, 2014). Dans ce cas, les seuils et exposants sont différents. Pour la percolation isotrope, la valeur des exposants critiques est reportée en Tab. 11.4.

Exposant	Valeur
β	0,41
γ	1,82
ν	0,88

Tab. 11.4 – Exposants critiques en percolation isotrope (Torquato, 2002)

Dans le cadre de notre travail, nous considérerons les relations Eq. (11.5), Eq. (11.6) et Eq. (11.7) mais exprimées en fraction volumique. La probabilité de percolation P est qualifiée de paramètre d'ordre car elle quantifie la présence ou non de percolation. Cette caractéristique est également fournie par $\langle \chi_{perc} \rangle$ et $\langle f_{perc} \rangle$ et nous supposons par conséquent que ces deux grandeurs divergent avec un exposant β .

Afin de vérifier dans quelle mesure les caractéristiques d'apparition des amas percolants suivent bien une théorie de la percolation, nous tentons d'estimer ici ces exposants. Insistons bien sur le terme « tentons » car il ne s'agira que d'estimations grossières : une détermination précise nécessiterait de multiplier les simulations (en particulier près du seuil de percolation) et surtout dans des domaines beaucoup plus grands pour limiter les effets de taille finie.

Débutons par l'exposant ν qui caractérise la divergence de la longueur de corrélation. Sans calculer cette dernière, il reste possible d'estimer ν en utilisant la relation suivante

$$\phi_{cr}^\infty - \phi_{cr}^L \propto 1/L^{1/\nu} \quad (11.8)$$

Cette expression traduit en fait les effets déjà évoqués de taille finie du système sur le seuil de percolation, avec en particulier une diminution du seuil notée pour les petits systèmes.

La Fig. 11.16 montre l'évolution de la quantité $\Delta\phi = \phi_{cr}^\infty - \phi_{cr}^L$ en fonction de $1/L$. Une régression en puissance sur ces résultats fournit $1/\nu \approx 1,42$. En prenant en compte les incertitudes sur les valeurs du seuil, nous obtenons l'estimation suivante : $\nu \approx 0,7 \pm 0,1$.

Pour les grandeurs explicitement calculées, comme $\langle \chi_{perc} \rangle$, $\langle S \rangle$ et $\langle f_{perc} \rangle$, l'idée est de directement réaliser une régression en puissance en fonction de $\phi - \phi_{cr}^L$. Les lois d'échelle n'étant valides

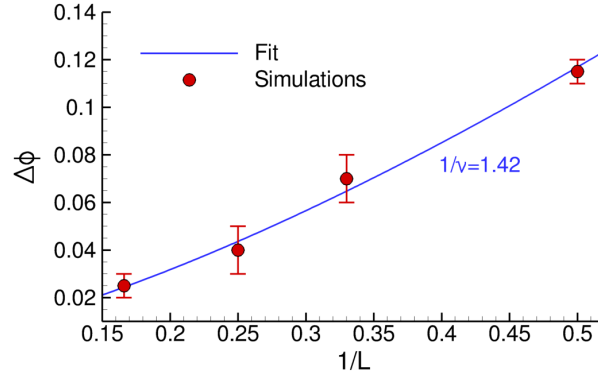


Fig. 11.16 – Evolution de $\Delta\phi = \phi_{cr}^\infty - \phi_{cr}^L$ en fonction de l'inverse de la taille L de la suspension.

que près du seuil, seules les quelques valeurs de ϕ les plus proches de ϕ_{cr}^L sont considérées. Les lois d'échelle suivantes sont obtenues :

$$\begin{aligned}\langle\chi_{perc}\rangle &\propto (\phi - \phi_{cr}^L)^{2,2\pm 0,3} \\ \langle f_{perc}\rangle &\propto (\phi - \phi_{cr}^L)^{2,9\pm 0,1} \\ \langle S\rangle &\propto |\phi - \phi_{cr}^L|^{-1,7\pm 0,3}\end{aligned}$$

La Fig. 11.17 illustre un exemple de régression sur la quantité $\langle f_{perc}\rangle$ pour trois tailles de suspension et présente les points de simulation en fonction de $\phi - \phi_{cr}^L$ ainsi que les lois en puissance obtenues. L'exposant semble ici peu changer avec la taille L du système ; la véritable valeur serait toutefois celle obtenue dans le cas $L \rightarrow \infty$. Nous avons ici choisi de moyenner les trois valeurs obtenues (le système $L=60a$ n'a pas été considéré faute d'un nombre suffisant de points près du seuil).

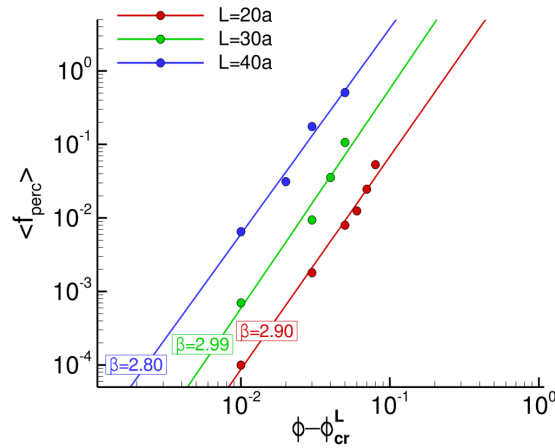


Fig. 11.17 – Evolution de $\langle f_{perc}\rangle$ en fonction de $\phi - \phi_{cr}^L$ et régression en puissance associée pour trois tailles L de suspension.

Le tableau suivant Tab. 11.5 synthétise les exposants obtenus avec ceux attendus théoriquement si les lois classiques de la percolation isotrope sont respectées. Rappelons encore une fois que les exposants calculés ne doivent être vus que comme des estimations relativement grossières.

Grandeur	Exposant	Théorie	Simulation
$\langle \chi_{perc} \rangle$	β	0,41	$2,2 \pm 0,3$
$\langle f_{perc} \rangle$	β	0,41	$2,9 \pm 0,1$
$\langle S \rangle$	γ	1,82	$1,7 \pm 0,3$
ξ_{corr}	ν	0,88	$0,7 \pm 0,1$

Tab. 11.5 – Exposants critiques théoriques et obtenus par simulation

Les exposants critiques pour $\langle S \rangle$ et ξ_{corr} s'avèrent relativement cohérents avec la théorie, ce qui sous-entend que la dynamique de croissance des amas et les effets dimensionnels dans une suspension sont assez bien décrits par la théorie classique. Un écart très important est toutefois relevé pour les paramètres d'ordre $\langle \chi_{perc} \rangle$ et $\langle f_{perc} \rangle$ qui divergent avec des exposants nettement plus forts que ceux attendus théoriquement. Nous n'avons pas d'explications à ces écarts et il semble donc prématuré de conclure quant à la pertinence de la théorie de la percolation isotrope pour décrire le comportement d'une suspension.

11.7 Accord avec la théorie de De Gennes

En 1979, De Gennes propose un cadre théorique sur la percolation d'amas dans les suspensions (De Gennes, 1979). Ce modèle – encore à l'heure actuelle souvent invoqué – ne se base pourtant que sur un ensemble de conjectures. Malgré l'aura scientifique de l'auteur, il semble, à notre connaissance, qu'un grand nombre de postulats proposés dans cette étude n'ait toujours pas été vérifié. Nous nous proposons ici d'utiliser les résultats de simulation numérique pour confirmer (ou non) un certain nombre d'assertions contenues dans cet article. Les énoncés suivants sont textuellement issus de la référence De Gennes (1979).

"There must exist a non-vanishing probability for one sphere to be in exact contact with one (or more) other spheres. This probability [...] is an increasing function of ϕ ".

Vrai.

Du fait de leur rugosité, il existe une possibilité de véritable contact entre particules en dépit de la force de lubrification. Le nombre de contacts augmente effectivement avec la fraction volumique comme le montre l'évolution du nombre de coordination (Fig. 11.11).

"We postulate that when ϕ exceeds a critical value (of order 1/5), an infinite cluster appears in analogy with percolation problems".

Vrai.

Il existe effectivement un seuil critique ϕ_{cr} au-delà duquel un amas percole dans tout le domaine et le seul bémol sur cette conjecture concerne la valeur annoncée de 0,2, déduite de certaines expériences sur suspensions colloïdales (Vadas *et al.*, 1976). Nos simulations révèlent un seuil légèrement supérieur, aux environs de 0,3. Ce dernier dépend néanmoins du confinement, du frottement et des rugosités ; il existe sans aucun doute une configuration idoine présentant une percolation à $\phi_{cr} \approx 0,2$ (suspension confinée avec particules frottantes et rugueuses). La présence d'interactions colloïdales est aussi susceptible d'affecter ce seuil.

"Clusters have a branched structure. [...] We find that one sphere may be in contact [...] simultaneously with up to eight neighbours".

Vrai.

Les amas percolants montrent la plupart du temps une structure présentant quelques embranchements, comme en Fig. 11.5. Même si la coordinence dans les amas reste faible en moyenne (de l'ordre de 2), le maximum recensé de contacts simultanés pour une particule est effectivement de 8. Cette

valeur est obtenue à $\phi_{bulk}=0,5$; pour les fractions plus faibles (entre 0,3 et 0,4), ce maximum se situe plutôt entre 6 et 7.

"The clusters are not permanent. While rotating in ambient fluid, some links are removed, and some others are established".

Vrai.

Les simulations confirment la nature très transitoire de ces amas avec, pour une large gamme de fraction volumique, des temps d'existence très courts, de l'ordre de $\dot{\gamma}^{-1}/10$. Rappelons qu'il existe cependant une fraction assez élevée (de l'ordre de 0,4) au-delà de laquelle la percolation est permanente. Dans ce dernier cas, l'amas possède une structure évoluant continuellement mais percole toujours.

"Scaling near threshold is given by standard isotropic percolation".

Peut-être...

Plus précisément, De Gennes postule que la proportion $\langle f_{perc} \rangle$ de particules appartenant à l'amas percolant et la longueur de corrélation ξ_{corr} suivent les lois d'échelle suivantes : $\langle f_{perc} \rangle \propto (\phi - \phi_{cr})^\beta$ et $\xi_{corr} \propto (\phi - \phi_{cr})^\nu$. Pour β , quelques réserves sont explicitement exprimées en précisant que : *"The exponent β may (or may not) coincide with the corresponding exponent for the standard percolation problem $\beta=0.39$ "*³⁹. Notre détermination des exposants critiques – bien que sujette à caution – fournit une valeur d'exposant pour $\langle f_{perc} \rangle$ qui est nettement plus élevée que celle postulée (2,9 vs. 0,41). L'exposant ν semble au contraire assez proche de l'attendu théorique.

En conclusion, on saluera l'intuition physique de De Gennes puisque ses conjectures se sont avérées plutôt pertinentes. Dans cet article sont également postulés des liens forts entre percolation et rhéologie ; ceci fait l'objet de la section suivante.

11.8 Lien avec la rhéologie

La percolation d'amas est souvent invoquée pour tenter d'expliquer certaines propriétés rhéologiques des suspensions. Cette notion d'amas et de percolation peut ainsi se retrouver au cœur de certains modèles de rhéologie (Campbell et Forgacs, 1990; Chang et Powell, 1993; De Gennes, 1979; Mills, 1985; Mills et Snabre, 2009). Concernant les différences de contraintes normales, Boyer *et al.* (2011) conjecturent un possible lien entre la présence d'amas percolants dans la suspension et l'existence de ces différences de contraintes normales. Expérimentalement en effet, les différences de contraintes normales ne semblent mesurables qu'au-delà d'une fraction seuil de 0,2 (Boyer *et al.*, 2011; Couturier *et al.*, 2011; Dbouk, 2011), celle-là même où De Gennes (1979) situe la percolation. Les fluctuations temporelles des grandeurs rhéologiques sont également quelquefois expliquées par l'existence d'un réseau percolant (Chang et Powell, 1993; Lefebvre, 2007b; Singh et Nott, 2000). C'est tout ce lien entre rhéologie et percolation d'amas que nous tenterons d'éclairer dans la partie qui va suivre.

Entamons avec l'existence d'un éventuel seuil sur les contraintes normales. Contrairement aux expériences (Boyer *et al.*, 2011; Couturier *et al.*, 2011; Dbouk, 2011), les simulations ne confirment pas cette hypothèse : les contraintes normales – et leur différence – existent même pour les fractions volumiques très faibles et ce, sans présence nécessaire de percolation. Il est vrai que dans ces régimes assez dilués, typiquement de fraction inférieure à 0,2~0,3, les différences N_1 et N_2 restent très petites et donc difficiles à mesurer. S'il existe un seuil, c'est donc plutôt celui de la résolution de la mesure. Le lien entre différence de contraintes normales et percolation est donc assez spéculatif et n'est pas corroboré par nos simulations.

39. A comparer avec la valeur légèrement différente et couramment admise actuellement de $\beta=0,41$.

Un aspect de cette étude est de chercher à évaluer globalement l'effet de la présence d'amas percolants sur les propriétés rhéologiques de la suspension. Pour ce faire, il est possible d'étudier l'évolution temporelle de certaines grandeurs rhéologiques (on se limitera ici à Σ_{xy}^p et Σ_{yy}^p) et d'y adjoindre l'information concernant l'existence d'un réseau percolant. Une telle représentation est proposée en Fig. 11.18 où les portions de courbe colorées en rouge signalent la présence d'une percolation. La suspension considérée est à la fraction $\phi_{bulk}=0,34$, soit un régime où une percolation commence à se développer ($\langle \chi_{perc} \rangle \approx 0,1$).

L'analyse reste très qualitative mais il semble difficile à partir de ces résultats de tirer des conclusions quant à un lien clair entre apparition de percolation et niveau de contrainte. Contrairement à certaines affirmations reportées dans la littérature, il apparaît que les fluctuations des grandeurs rhéologiques ne sont pas directement corrélées à la présence d'un réseau percolant : certains extrema locaux de contrainte apparaissent sans amas percolants tandis qu'un régime percolant peut être présent sans contraintes importantes.

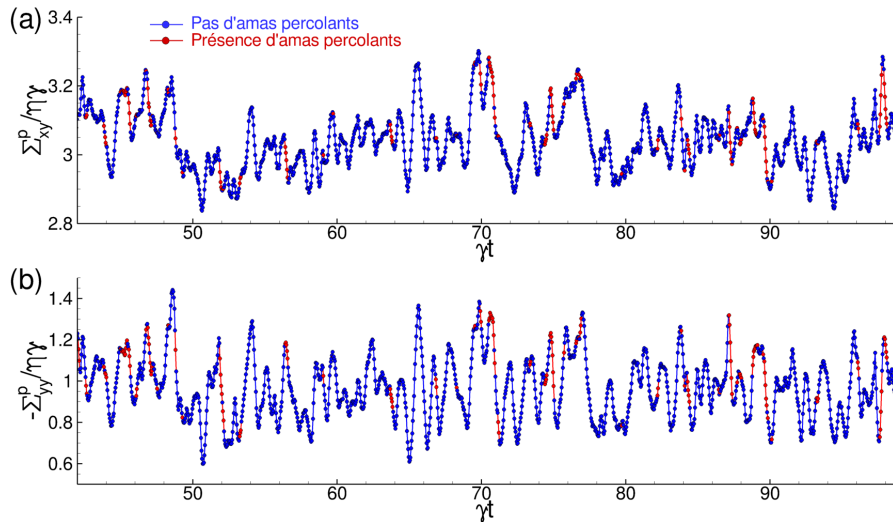


Fig. 11.18 – Evolution temporelle de $\Sigma_{xy}^p / \eta \dot{\gamma}$ et $-\Sigma_{yy}^p / \eta \dot{\gamma}$ pour une suspension à $\phi_{bulk}=0,34$ ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$). Les courbes sont colorées en rouge lorsqu'au moins un amas percolant est détecté.

Il est possible de quantifier plus précisément ce lien entre percolation et rhéologie en estimant la fraction de la contrainte totale effectivement supportée par le réseau de percolation. On définit ainsi un tenseur moyen de contraintes W_{ij} par

$$W_{ij} = \left\langle \frac{1}{f_{perc}} \frac{\Sigma_{ij}^{perc}}{\Sigma_{ij}^p} \right\rangle_{perc} \quad (11.9)$$

où Σ_{ij}^{perc} est la contrainte dans les amas percolants et $\langle \cdot \rangle_{perc}$ représente une moyenne temporelle conditionnelle (calculée uniquement lorsqu'il y a percolation) sur toute la suspension. Le tenseur W_{ij} peut donc être vu comme le rapport de la contrainte moyenne par particule dans le réseau percolant sur la contrainte moyenne par particule dans la suspension. Le Tab 11.6 reporte pour trois fractions volumiques quelques valeurs de composantes de W_{ij} .

L'effet est assez modeste sur la composante xy – et donc sur la viscosité – avec des contraintes 20 à 30 % plus élevées dans le réseau percolant. Le rôle des amas percolants sur les contraintes normales est en revanche plus marqué avec, selon la fraction, un doublement voire un triplement de la contrainte. Dit autrement, les particules d'un réseau percolant contribuent en moyenne à une contrainte

ϕ_{bulk}	W_{xy}	W_{xx}	W_{yy}	W_{zz}
0,34	1,39	3,39	2,90	2,92
0,36	1,27	2,78	2,47	2,45
0,38	1,22	2,32	2,12	2,08

Tab. 11.6 – Fraction relative de la contrainte W_{ij} dans le réseau percolant (Eq. (11.9)) pour trois fractions volumiques ϕ_{bulk} ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$).

normale qui peut être trois fois supérieure à celle des autres particules. Cet effet est manifeste mais toutefois pas suffisant pour être mis en évidence sans ambiguïté à travers des mesures rhéologiques globales, comme l'a montré la Fig. 11.18. Ceci s'explique par le faible nombre de particules impliquées dans ces amas percolants : seulement $\langle f_{perc} \rangle \approx 1\%$ à $\phi_{bulk}=0,34$. La contribution relative W_{ij} diminue avec la fraction volumique, ce qui rend peu probable un rôle manifeste de la percolation sur la rhéologie de la suspension, même aux fractions plus élevées. Notons que les expériences de Blanc *et al.* (1983) confortent ce point et n'attestent pas de modifications de viscosité à la fraction critique. Un calcul équivalent mais basé sur les contraintes de contact mène à des conclusions similaires.

S'il n'existe pas de lien direct entre présence de réseau percolant et fluctuations des grandeurs rhéologiques, ces dernières s'expliquent peut-être en termes de taille d'amas dans la suspension. On réitère donc l'exercice précédent de la Fig. 11.18 en spécifiant par des couleurs la taille moyenne $\langle S \rangle$ des amas. Le résultat est présenté en Fig. 11.19 toujours pour $\phi_{bulk}=0,34$ où l'on montre encore une fois l'évolution de Σ_{xy}^p et Σ_{yy}^p . Une corrélation forte – si elle existait – devrait être visible sur ce genre de représentation. Ce ne semble pas être le cas ici même si l'on note que lors des minima de contrainte, il n'y a jamais de gros amas présents.

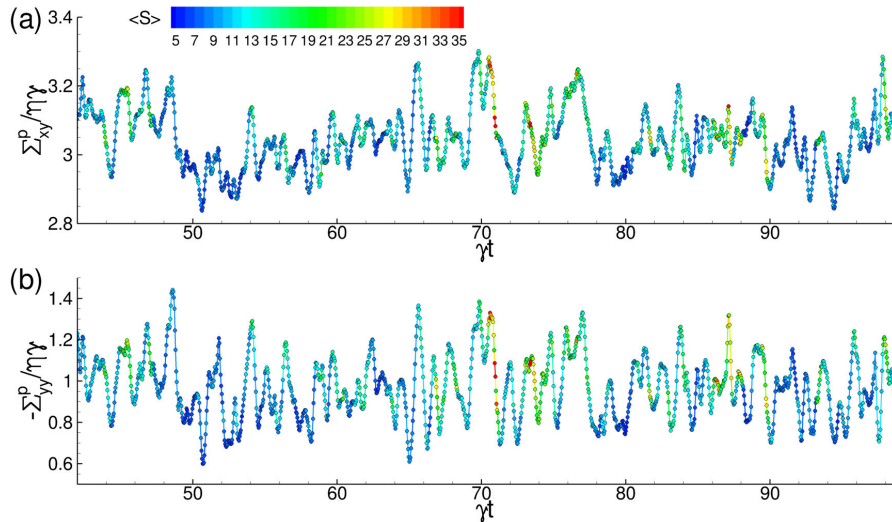


Fig. 11.19 – Evolution temporelle de $\Sigma_{xy}^p/\eta\dot{\gamma}$ et $-\Sigma_{yy}^p/\eta\dot{\gamma}$ pour une suspension à $\phi_{bulk}=0,34$ ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$). Les courbes sont colorées selon la taille moyenne $\langle S \rangle$ de l'amas.

De la même manière que précédemment pour W_{ij} , il est possible de quantifier la fraction relative de la contrainte en fonction de la taille k de l'amas. On définit ainsi un tenseur de contrainte Z_{ij}^k par

$$Z_{ij}^k = \left\langle \frac{1}{s_k} \frac{\Sigma_{ij}^{p,k}}{\Sigma_{ij}^p} \right\rangle \quad (11.10)$$

où $\Sigma_{ij}^{p,k}$ est la contrainte particulière dans les k -mères (amas de k particules). Ce tenseur exprime le

rapport entre la contrainte moyenne d'une particule dans un k -mère et la contrainte moyenne d'une particule dans la suspension. La Fig. 11.20 représente l'évolution de Z_{xy}^k et Z_{yy}^k en fonction de la taille k de l'amas.

Pour ces deux composantes, la contrainte relative augmente avec la taille de l'amas avant d'arriver à un seuil pour k de l'ordre de 30 à 40 ici. Au-delà de ce seuil, la contrainte relative moyenne n'évolue plus : les gros amas (supérieurs à ce seuil) ne sont donc pas nécessairement reliés à des contraintes plus élevées. Seuls les amas extrêmement petits (principalement les monomères) véhiculent une contrainte inférieure à la contrainte moyenne. On notera que les monomères induisent un Z_{yy} négatif (donc une contrainte Σ_{yy} positive), ce qui est aussi le cas pour certains gros amas (vu leur nombre plus réduit, les statistiques sont toutefois moins précises). En relatif, les gros amas contribuent donc plus aux contraintes dans la suspension. Cette augmentation est d'environ 20 % pour la composante xy mais plus du double pour yy . Ceci peut expliquer les tendances observées en Fig. 11.19 à savoir que les faibles contraintes instantanées se corrèlaient à la présence de très petits amas. Soulignons enfin que la proportion des petits amas est beaucoup plus importante (voir une distribution de s_k en Fig. 11.1) et que la contribution totale (et non plus relative) à la contrainte vaut $s_k Z_{ij}^k$ et dépend donc aussi de la distribution s_k .

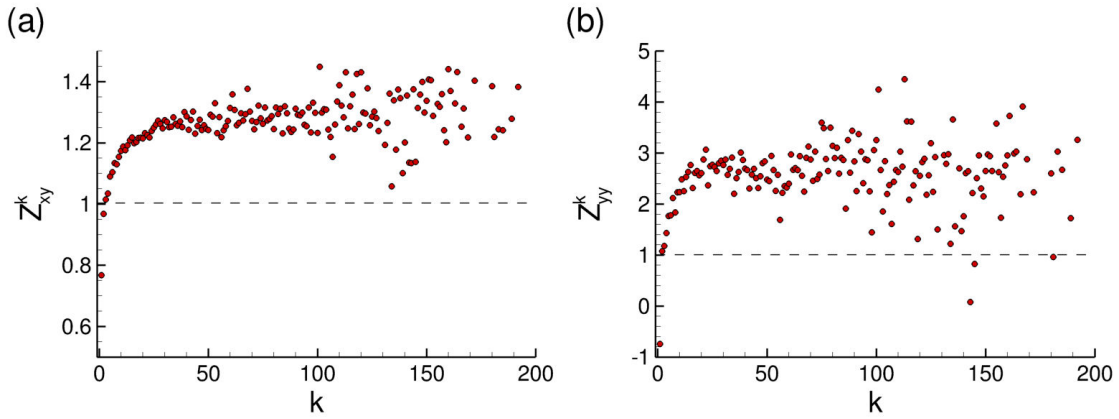


Fig. 11.20 – Fraction relative de la contrainte : Z_{xy}^k (a) et Z_{yy}^k (b) (voir Eq. (11.10)) en fonction de la taille k de l'amas pour une suspension à $\phi_{bulk}=0,34$ ($L_y/a=20$; $\mu_d=0$; $\xi_{rug}=5.10^{-3}$).

Terminons en tentant d'évaluer une corrélation entre la rhéologie (ici, la viscosité) et des paramètres liés aux amas, comme dans certains modèles rhéologiques. Un premier choix naturel est la taille de l'amas $\langle S \rangle$. Il est par contre peu pertinent d'utiliser des grandeurs liées à la percolation, comme par exemple $\langle f_{perc} \rangle$, car elles sont uniformément nulles en-dessous du seuil de percolation. A la place, nous proposons de considérer la fraction $\langle f_{biggest} \rangle$ des particules appartenant au plus gros amas. La Fig. 11.21 présente l'évolution de la viscosité relative η_r en fonction de ces deux grandeurs $\langle S \rangle$ et $\langle f_{biggest} \rangle$. Il est intéressant de constater une relation bijective entre viscosité et paramètres d'amas. Cependant, les résultats diffèrent selon la présence ou non de frottement et il n'existe donc pas de courbe maîtresse unique qui aurait permis de prouver un lien fort entre rhéologie et amas. Peu de différences qualitatives sont notées entre les deux choix de paramètre d'amas.

En conclusion, le lien entre rhéologie et amas/percolation est très tenu. Certes, les amas percolants et les gros amas véhiculent des contraintes plus élevées que la moyenne. Mais le nombre de particules impliquées reste faible en conséquence de quoi, l'effet global est limité et difficilement mesurable expérimentalement. Notons que la contrainte relative W_{ij} des amas percolants (Tab 11.6) se situe typiquement dans la gamme des valeurs moyennes de Z_{ij}^k pour les gros amas (Fig. 11.20) : du point de vue rhéologique, il y a donc peu de différences entre un amas percolant et un amas de

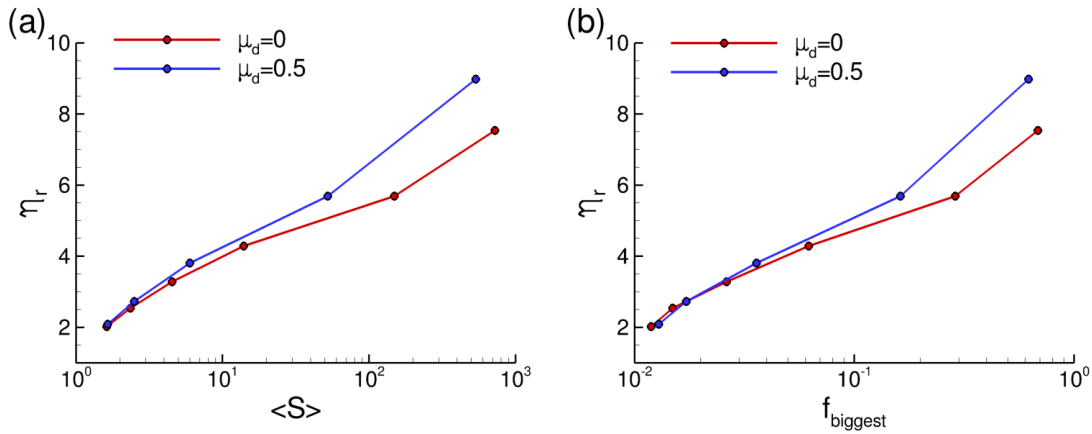


Fig. 11.21 – Viscosité relative en fonction de la taille d'amas $\langle S \rangle$ (a) et de la fraction $\langle f_{\text{biggest}} \rangle$ des particules appartenant au plus gros amas (b) ($L_y/a=20$; $\xi_{\text{rug}}=5 \cdot 10^{-3}$).

grande taille. C'est un point de divergence avec De Gennes (1979) qui prédit un changement dans l'allure de la courbe de viscosité au passage du seuil de percolation alors que nos résultats ainsi que les expériences de Blanc *et al.* (1983) ne montrent pas de tels effets. Il n'y a pas de modifications rhéologiques lors du passage au seuil de percolation. L'augmentation de viscosité avec la percolation citée dans des études numériques plus anciennes résulte probablement d'un artefact lié à un nombre excessivement réduit (quelques dizaines) de particules, l'amas percolant regroupant alors la quasi-totalité des particules.

Les résultats de nos calculs sont similaires pour les autres fractions étudiées, entre 0,3 et 0,4. Le rôle du frottement n'a toutefois pas été abordé et il serait nécessaire de conforter ces conclusions également dans le cas frottant.

QUELQUES PERSPECTIVES DE SIMULATION

Pendant la durée de cette thèse, les travaux de simulation ont abordé trois aspects particuliers des suspensions : le frottement, le confinement et la percolation. Les perspectives possibles avec le code développé sont assez larges. Certaines concernent quelques développements numériques complémentaires; d'autres se devront d'aborder de manière plus concrète la relation entre cette physique des suspensions et la problématique industrielle initiale, liée au procédé de fabrication des propergols. Ce sont ces perspectives que nous esquissons ici et qui permettent de renforcer le lien entre physique académique et applications industrielles.

12.1 Améliorations du modèle

Ces améliorations peuvent concerner des aspects numériques ou physiques. Concernant le volet purement numérique, il semble nécessaire de procéder à une parallélisation du code, qui n'est que séquentiel à ce stade. Cette parallélisation permettrait de diviser le temps de calcul de manière importante et autoriserait des simulations plus importantes et plus rapides. Dans le cadre de la version séquentielle de notre code, il n'est en effet guère possible de traiter plus de quelques milliers de particules. Par ailleurs, les simulations les plus longues ont nécessité plus de deux mois de calcul.

Il est également apparu quelques limitations liées au modèle physique employé, comme la monodispersité notamment. Les simulations réalisées dans le cadre de ce travail considèrent toujours des particules de même taille. Pour les fractions volumiques importantes, cette monodispersité conduit à une structuration qui n'est généralement pas attestée expérimentalement car les suspensions réelles présentent toujours une polydispersité même faible. Une amélioration consisterait alors à traiter des suspensions avec des particules de taille différente. Une partie du travail a déjà été réalisée car le code est écrit de manière générale avec la prise en compte de rayons différents; en particulier, les interactions théoriques de lubrification dans ce cas sont déjà intégrées. Il resterait alors à tabuler les interactions de lubrification non-résolues en fonction de la distance interparticulaire et du rapport des rayons.

Des améliorations du modèle physique de contact seraient également à considérer. Notre choix s'est porté sur un modèle de Hertz avec une raideur fonction de la rugosité. Une constatation est une absence notée de rhéofluidification : pour une large gamme de $\dot{\Gamma}$ (taux de cisaillement adimensionné par une force de contact), nos simulations prédisent une viscosité indépendante de $\dot{\Gamma}$ alors qu'expérimentalement, les suspensions réelles montrent généralement une rhéofluidification. L'évolution des grandeurs rhéologiques avec le taux de cisaillement a effectivement été très peu abordée dans ce travail. Il semble ainsi manquer quelques ingrédients physiques concernant le modèle de contact qui reste encore un peu trop simplifié.

12.2 Modèles continus

Les simulations microscopiques (i.e., à l'échelle des particules) sont riches d'enseignement mais inadaptées pour traiter des configurations industrielles, souvent de géométrie complexe et de grande échelle. Qui plus est, les problématiques industrielles ne recherchent souvent qu'une réponse macroscopique globale. Ceci justifie de considérer des approches continues dans lesquelles la suspension est assimilée à un fluide homogène possédant des lois constitutives spécifiques. Au cours de ce travail, nous avons eu l'occasion de considérer le SBM ("*Suspension Balance Model*") de Morris et Boulay (1999) qui est à l'heure actuelle le modèle couramment utilisé le plus avancé. Le SBM repose sur l'idée que le comportement global de la suspension est contrôlé par la contrainte particulaire Σ^p . Cependant, cette hypothèse est actuellement controversée et la nature exacte du tenseur des contraintes à introduire dans le modèle est incertaine. En particulier, des travaux théoriques de Lhuillier (2009) et de Nott *et al.* (2011) montrent qu'il serait théoriquement nécessaire de considérer un autre tenseur s'apparentant plutôt à la contribution du contact Σ^c .

L'intérêt de la simulation microscopique serait de pouvoir fournir des éléments de réponse à ce débat ainsi que de proposer des constantes de fermeture à ces modèles avancés. En particulier, il devrait être possible de réaliser une homogénéisation numérique, proche de celle effectuée théoriquement.

Ainsi, dans la démarche proposée par Nott *et al.* (2011), l'idée est de considérer un opérateur de moyenne $\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ où \mathbf{y} représente le domaine spatial microscopique d'origine et \mathbf{x} le domaine spatial des variables moyennées. La moyenne volumique $\langle \Psi(\mathbf{x}) \rangle$ d'une grandeur microscopique $\Psi(\mathbf{y})$ est alors définie par

$$\langle \Psi(\mathbf{x}) \rangle = \int \Psi(\mathbf{y}) \mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dV \quad (12.1)$$

La fonction \mathcal{G} doit être d'intégrale unitaire et tendre vers 0 à l'infini. Elle effectue une moyenne spatiale locale sur une échelle l qui peut être estimée par

$$\int_{|\mathbf{y}-\mathbf{x}|<l} \mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dV = \frac{1}{2} \quad (12.2)$$

L'homogénéisation consiste alors à considérer les équations de conservation de masse et de quantité de mouvement (valables localement en chaque point \mathbf{y}) en les multipliant par $\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ puis à les intégrer sur tout le volume. En notant $\chi(\mathbf{y})$ la fonction indicatrice des particules, il est possible d'aboutir à une homogénéisation sur la phase particulaire ou la phase fluide, en multipliant plutôt par $\chi(\mathbf{y})\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ ou $(1 - \chi(\mathbf{y}))\mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$. Cette technique formelle conduit à des expressions mathématiquement complexes mais elle permet d'aboutir à une équation moyennée sur la quantité de mouvement de la phase particulaire : les travaux de Nott *et al.* (2011) mettent en lumière que le tenseur des contraintes $\langle \Sigma \rangle^p$, moyenné dans la phase particulaire, est plus complexe que la contrainte de Batchelor Σ^p comme nous l'avons déjà précisé.

Une perspective serait de réaliser cet exercice d'homogénéisation mais de manière numérique. La simulation permet d'accéder à un champ local de vitesse et de contrainte qui pourrait être moyenné pour obtenir des informations homogénéisées. Ces dernières pourraient être directement comparées avec la théorie de Nott *et al.* (2011) mais serviraient aussi à déterminer ou vérifier certaines lois de fermeture. En effet, l'approche théorique de Nott *et al.* (2011) établit des lois générales de conservation exprimées en fonction de grandeurs micromécaniques moyennes comme par exemple $\langle \mathbf{F}^h \rangle$ ou $\langle \Sigma^c \rangle$. Pour aboutir à un modèle utilisable, ces moyennes doivent être exprimées en fonction de grandeurs macroscopiques basées sur des variables cinématiques comme une vitesse moyenne ou un taux de déformation. Dans son article, Lhuillier (2009) propose certaines relations fonctionnelles pour ces lois de fermeture comme par exemple $\langle \mathbf{F}^h \rangle = f(\phi, \langle \mathbf{U} \rangle, \mathbf{E})$. Ces lois font apparaître un certain nombre de fonctions de ϕ , souvent non connues, et que seule une approche numérique microscopique

pourrait déterminer dans le cas général. Nous terminerons en soulignant que les simulations devront être réalisées dans un domaine L suffisamment grand pour autoriser la séparation d'échelle $a \ll l \ll L$ qui est une hypothèse nécessaire à cette approche d'homogénéisation.

12.3 Simulation couplée écoulement-combustion

Une problématique industrielle sous-jacente qui a motivé ces travaux est celle du rôle de la microstructure de la suspension sur les propriétés finales du propergol, en particulier sa combustion. Cette dernière est – comme nous l'avons vu – fonction localement de la fraction et de la taille des particules et peut être affectée par une structure anisotrope ou la percolation. L'intérêt de l'approche microscopique développée est qu'elle résout la physique à l'échelle de la particule et permet d'accéder explicitement à la microstructure de la suspension sous une sollicitation donnée. Il est ainsi séduisant de considérer cette microstructure calculée comme donnée d'entrée à des simulations directes de combustion. Par simulation directe de la combustion, nous entendons une description détaillée de la physique de la combustion des propergols, toujours à l'échelle des particules. Il s'agit en quelque sorte d'une approche équivalente au code d'écoulement développé, mais pour la combustion. Il s'avère que ce type de modèle assez récent fait l'objet de travaux de l'auteur⁴⁰.

La figure suivante illustre une telle simulation tridimensionnelle (coupe 2D) de combustion d'un propergol solide (Plaud et Gallier, 2014). La partie supérieure est la phase gazeuse, siège des différents systèmes de flamme et réactions chimiques, tandis que la partie inférieure est le propergol solide, qui a figé en son sein la microstructure de la suspension. Les particules y sont clairement visibles.

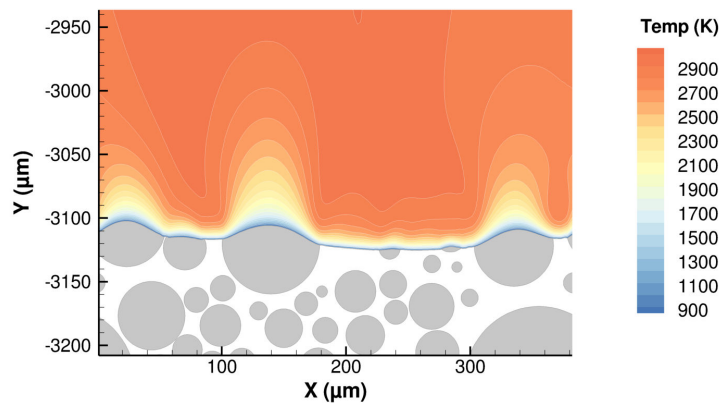


Fig. 12.1 – Simulation directe de la combustion d'un propergol solide (coupe 2D, champ de température gaz) (Plaud et Gallier, 2014).

L'idée serait donc de coupler ces deux outils de simulation : sous une sollicitation donnée, notre code d'écoulement serait à même de calculer explicitement une microstructure des particules, microstructure qui pourrait directement servir de donnée d'entrée au code de combustion qui permet quant à lui de déterminer la vitesse de combustion. Il deviendrait ainsi possible d'étudier plus finement le lien procédé de fabrication / microstructure / combustion. Des essais préliminaires ont par exemple permis de mettre en évidence des effets notables de la migration sur la combustion, en simulant un écoulement de Poiseuille puis en « brûlant » numériquement l'arrangement non-homogène obtenu.

40. Hors du cadre de cette thèse bien entendu et en collaboration avec Mathieu Plaud (CRB, Vert-le-Petit)

12.4 Transferts de chaleur dans les suspensions

D'un point de vue académique, les études de Metzger *et al.* (2013) montrent que la présence des particules dans une suspension cisailée permet un mélange accru et conduit à une diffusivité thermique effective nettement plus élevée que celle du fluide seul. La compréhension et la prédiction de ces transferts de chaleur dans les suspensions ont également un intérêt industriel dans le domaine des propergols. En effet, la suspension de propergol est chauffée pour effectuer la réticulation du polymère et la question est de savoir s'il existe des mouvements de fluide dûs aux gradients thermiques qui pourraient modifier la microstructure. Par ailleurs, lors de certaines sollicitations extrêmes liées à des études de sensibilité, la suspension de propergol peut être cisailée si fortement qu'elle s'échauffe et peut s'initier.

Dans sa version la plus simple, la modélisation consiste à transporter un scalaire passif κ . Cette grandeur peut représenter une température, une concentration, etc. et son évolution est gouvernée par une équation de convection-diffusion

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \kappa = \nabla \cdot (D_\kappa \nabla \kappa) \quad (12.3)$$

avec D_κ le coefficient de diffusion associé à κ . Cette équation se résout de manière classique avec des techniques numériques analogues à celles déjà employées pour traiter le fluide par exemple.

La figure suivante se propose d'illustrer le transport d'un scalaire dans une suspension cisailée à $\phi_{bulk}=0,35$ et montre un champ instantané de $\kappa(\mathbf{x})$ dans le plan de cisaillement (coupe en $z=L_z/2$) après 300 déformations. Le champ initial $\kappa^0=\kappa(\mathbf{x}, t=0)$ est de 1 à la paroi inférieure ($y=0$) et 0 ailleurs dans la suspension et la diffusion est supposée nulle ($D_\kappa=0$). On notera une répartition hétérogène de κ et un mélange intense entièrement imputable aux perturbations de vitesse induites par les particules. Comme la diffusion est supposée nulle, un fluide seul cisailé implique $v=0$ et aucun transfert dans la direction y , d'où $\kappa=\kappa^0$.

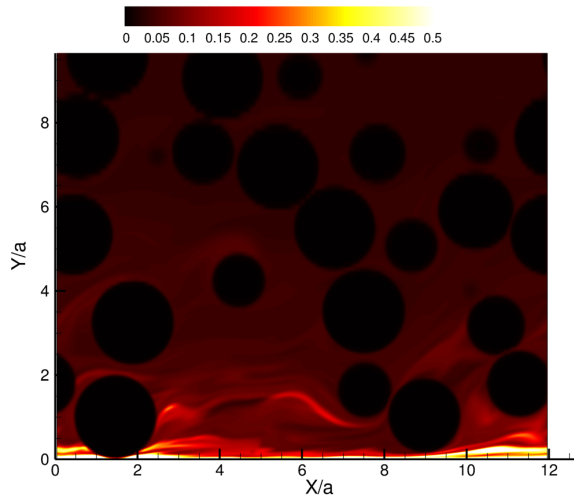


Fig. 12.2 – Exemple d'un champ instantané d'un scalaire passif κ obtenu par simulation (coupe 2D). Les particules sont apparentes sous la forme de disques noirs.

SYNTHÈSE ET CONCLUSION

Ce travail de thèse se consacre à la simulation numérique fine de suspensions concentrées. L'objectif affiché est de contribuer à une meilleure compréhension de la physique de tels milieux, en relation avec des problématiques industrielles liées à l'utilisation de suspensions de propergol en propulsion. Les configurations étudiées sont cependant restées académiques, à savoir des suspensions de sphères monodisperses, isodenses, non-browniennes et sollicitées en cisaillement simple.

Le travail effectué se scinde en deux parties. Une partie numérique tout d'abord avec le développement d'une approche générale adaptée aux suspensions concentrées. Vient ensuite un volet plus physique où la simulation est exploitée pour tirer des informations qualitatives et quantitatives sur la rhéophysique des suspensions, avec des études détaillées sur le rôle des forces de frottement, du confinement ou encore de la percolation des amas de particules.

Synthèse sur les approches numériques pour la simulation des suspensions

Ce travail a permis de proposer puis de développer entièrement une approche numérique générale et efficace dédiée aux suspensions concentrées. Il s'agit ici de simulation à l'échelle des particules, seule échelle pertinente pour traiter la physique nécessaire. Le cœur numérique repose sur une méthode de domaine fictif inspirée de Yu et Shao (2007) et quelque peu améliorée pour conserver une approche totalement eulérienne. Une partie importante du travail s'est concentrée sur une modélisation fidèle des forces de lubrification et de contact, vu leur rôle important dans les suspensions concentrées.

Concernant la lubrification, une approche robuste basée sur une décomposition résolue/non-réolue des matrices de résistance est proposée et s'inspire de méthodes employées en dynamique stokésienne. Tous les degrés de liberté des particules sont pris en compte et couplés dans le problème de lubrification, en particulier vitesses tangentielles et rotations. Ceci apporte une complexité supplémentaire mais nécessaire car d'importance non négligeable. Les corrections de lubrification sont également appliquées aux grandeurs rhéologiques comme le stresslet et la pression particulaire. Un soin particulier est apporté aux interactions de lubrification avec les parois, souvent traitées de manière incomplète dans les travaux publiés.

Enfin, les forces de contact sont modélisées par une méthode de type éléments discrets (DEM), approche fort prisée en simulation des milieux granulaires. Ce choix offre une vision plus physique du contact, en particulier la modélisation de la rugosité et du frottement. Au final, notre code propose une approche couplée hydrodynamique longue portée / lubrification / contact frottant qui ne semble pas reportée précédemment dans la littérature.

Un nombre important de validations, de complexité croissante, a permis de vérifier la pertinence de la méthode développée. Ces validations se sont cristallisées autour d'écoulements d'intérêt – en particulier des écoulements de Stokes en cisaillement – avec une à plus de 10^4 particules et toujours en veillant à privilégier l'aspect quantitatif et prédictif.

Comparée aux méthodes traditionnelles utilisées en rhéologie numérique (force-coupling ou dynamique stokésienne), notre approche se démarque par sa rapidité (le code est séquentiel) et son caractère plus général puisqu'à même de traiter des écoulements inertiels voire des particules de forme quelconque.

Synthèse sur le frottement

Un résultat important de ce travail est la mise en évidence du rôle capital des forces de frottement sur la rhéologie et l'écoulement d'une suspension concentrée homogène. Le frottement augmente notablement η_r et $|N_2|$ et diminue $|N_1|$, en accord avec les expériences disponibles. En particulier, le rapport N_2/N_1 est typiquement de 3 à 4, en cohérence avec les mesures de Zarraga *et al.* (2000), alors que les simulations antérieures (en non-frottant) reportaient systématiquement $N_2/N_1 \approx 1$. Le frottement n'est cependant pas suffisant pour expliquer à lui seul l'existence de valeurs mesurées positives de N_1 (Dbouk *et al.*, 2013). Il agit principalement en augmentant la contrainte de contact car la contrainte hydrodynamique reste inchangée. Des modifications sensibles sur la microstructure sont également notées et susceptibles d'expliquer les résultats sur les différences de contraintes normales. La séparation (possible numériquement) entre contribution hydrodynamique et contribution du contact révèle que N_1 et N_2 n'ont pas la même nature : N_1 est principalement d'origine hydrodynamique tandis que N_2 provient essentiellement du contact. Nous montrons également que dans les suspensions denses, la contrainte liée au contact représente la majeure partie de la contrainte totale, typiquement de l'ordre de 80 %. Un changement de comportement semble se dessiner pour les fractions volumiques supérieures à 0,4~0,45, en particulier pour les différences de contraintes normales. Il est possible que cette valeur délimite un régime différent, peut-être marqué par un rôle accru du contact.

Le lien avec les modèles continus est également étudié dans le cadre du SBM de Morris et Boulay (1999). Certaines données importantes du modèle, comme la viscosité normale ou les paramètres d'anisotropie, sont calculées et en meilleur accord avec les expériences quand le frottement est pris en compte. De même, nos résultats sont comparés avec les récents modèles de rhéologie globale $\mu(I_v)$ et se superposent approximativement sur une courbe maîtresse unique comme attendu d'après les travaux de Boyer *et al.* (2011). Le frottement apparaît cependant comme le responsable de petites déviations par rapport aux courbes maîtresses.

Le frottement joue également un rôle notable sur le niveau de fluctuation de vitesse et la diffusion, typiquement un facteur deux. Les simulations avec frottement se trouvent ainsi en meilleur accord avec les données expérimentales de diffusion (Metzger *et al.*, 2013; Pine *et al.*, 2005). Une hypothèse est que le mécanisme à l'œuvre ici pourrait être une augmentation sensible de la taille des amas qui promeut un déplacement corrélé de particules plus important.

On conclura donc en mettant en avant l'importance du frottement qui s'avère un ingrédient nécessaire des simulations pour une représentation fidèle des suspensions concentrées : dans tous les cas, une prise en compte du frottement avec un coefficient $\mu_d=0,5$ (une valeur classique pour les matériaux des particules des expériences académiques) a permis de s'accorder beaucoup mieux avec les résultats expérimentaux. Ceci signifie que le frottement est probablement à l'œuvre dans les suspensions réelles.

Synthèse sur le confinement

Les simulations montrent que les parois induisent un effet sensible sur la suspension, avec localement le développement d'un ordre très prononcé. La suspension se structure alors en bandes près des parois et cristallise sous forme hexagonale. Cette structuration existe toujours mais son ampleur et son étendue dépendent du confinement et de la fraction volumique. Pour un entrefer

$L_y=20a$, la zone affectée représente la moitié du domaine à $\phi_{bulk}=0,4$ mais la totalité de la suspension dès que $\phi_{bulk} \gtrsim 0,5$. Pour les fractions supérieures, et même dans les très grands domaines, nous notons une cristallisation complète indépendamment des parois. Ce résultat est attendu pour des suspensions monodisperses ; l'effet d'une polydispersité n'a par contre pas été évalué.

La structuration pariétale est relativement lente à se développer avec des temps caractéristiques typiques de quelques dizaines de $\dot{\gamma}^{-1}$. Elle induit des effets sur le champ de vitesse avec en particulier un glissement de la suspension. Celui-ci s'explique en partie par la présence des rugosités des particules qui fixent la distance particule-paroi et donc l'intensité de la lubrification. Ces effets conduisent, dans le cœur de la suspension, à un cisaillement moindre et une fraction volumique locale légèrement plus importante.

La structuration entraîne également des modifications rhéologiques. Celles-ci restent généralement limitées sur la viscosité. Dans les cas très structurés toutefois, une diminution de la viscosité avec la fraction volumique est notée. De même, l'impact sur N_2 reste modéré. L'effet le plus flagrant concerne N_1 : les simulations montrent alors que dans la zone structurée, N_1 change localement de signe et devient positif près des parois. Ceci provient d'une diminution de la contrainte de contact $|\Sigma_{xx}^c|$ dans la direction de la vitesse du fait d'un déplacement par couches. Selon le confinement et la fraction volumique, le N_1 total de la suspension peut s'annuler ou devenir positif, surtout dans le cas frottant.

Synthèse sur la percolation

Il s'agit des premiers travaux numériques entièrement dédiés à la percolation dans les suspensions non-browniennes. Les simulations montrent l'occurrence d'un seuil critique en fraction volumique au-delà duquel il existe des amas percolants sur toute la hauteur de la suspension. Du fait des effets de taille finie – classique en percolation – ce seuil ϕ_{cr} dépend de la taille du système et s'échelonne entre 0,28 et 0,4 (pour des hauteurs de domaine entre $20a$ et $60a$). Au-delà de 0,4, il existe dans tous les cas une percolation permanente (i.e., à chaque instant un amas percole dans la suspension). Le seuil de percolation ϕ_{cr} dépend assez sensiblement du frottement et de la rugosité qui tendent tous deux à promouvoir une percolation plus précoce. Dans le cas de la rugosité, cet effet n'est pas d'origine stérique. Pour les forts frottements et les grandes rugosités, la taille moyenne des amas augmente.

Les amas percolants sont globalement orientés selon la direction de compression et mobilisent un nombre limité de particules (environ 30 % à $\phi_{bulk}=0,4$). Ces amas sont de forme linéaire avec une coordinence moyenne d'environ 2. Avant le seuil de percolation permanente, leur temps de vie est faible, de l'ordre de $0,1\dot{\gamma}^{-1}$: les amas percolants sont très transitoires et se font et se défont continuellement.

La dynamique d'apparition et de développement des amas percolants semble suivre des lois d'échelle typiques de la percolation. Une estimation des exposants critiques est proposée et les résultats obtenus pour les exposants ν (longueur de corrélation) et γ (taille des amas) semblent compatibles avec la théorie de percolation isotrope. Par contre, pour les paramètres d'ordre (comme la fraction de particules dans les amas percolants ou la probabilité de percolation), nous obtenons des exposants cinq fois plus élevés que la théorie.

L'étude du lien entre percolation et rhéologie révèle que la percolation n'explique ni l'apparition des différences de contraintes normales, ni les fluctuations temporelles des grandeurs rhéologiques. Les amas percolants véhiculent en moyenne des contraintes plus élevées mais leur faible proportion ne permet pas d'expliquer un rôle marqué sur la rhéologie des suspensions. Il n'y a pas de modifications rhéologiques lors du passage au seuil de percolation.

Nous avons pu enfin vérifier un certain nombre de conjectures sur les amas percolants proposées par De Gennes (1979). La plupart d'entre elles s'est révélée juste, comme l'aspect transitoire, la forme ou la coordinence maximale. D'autres sont cependant plus sujettes à caution comme le rôle fort attendu sur la rhéologie ou la validité d'une description basée sur la théorie de la percolation isotrope.

Et ensuite...

Ce travail ouvre la voie à certains développements numériques complémentaires pour étendre les possibilités de simulation, comme la parallélisation, la prise en compte de particules non-sphériques ou de la polydispersité. Ce dernier point en particulier est important pour pouvoir traiter les régimes très denses (sans développement de structuration) et se rapprocher ainsi de suspensions expérimentales. Il serait également pertinent d'étudier le comportement rhéologique en fonction du taux de cisaillement (en particulier la rhéofluidification) et d'améliorer le modèle mécanique de contact en conséquence. D'autres travaux à venir, dans la continuité de cette thèse, chercheront à poursuivre la compréhension de la rhéophysique des suspensions en lien avec des systèmes plus complexes. Des études d'ores et déjà entamées – et détaillées dans le chapitre sur les perspectives – abordent la mise au point de modèles homogénéisés ainsi que le lien microstructure-combustion pour les propergols solides.

LE COIN DU NUMÉRICIEN

Ce chapitre regroupe quelques compléments sur certaines techniques d'ordre numérique utilisées dans le cadre de ce travail et abordées très (trop ?) brièvement. Il permet de développer quelque peu des descriptifs très lapidaires (comme pour le schéma semi-lagrangien) ou de revenir sur des choix numériques peu discutés (intégration temporelle).

A.1 Schémas d'intégration temporelle

Les équations de Navier-Stokes étant des équations aux dérivées partielles dépendant du temps et de l'espace, il reste à résoudre, après la phase de discrétisation spatiale, une équation différentielle en temps de type

$$\begin{aligned}\frac{du}{dt} &= f(u) \\ u(t=0) &= u_0\end{aligned}$$

Le temps est discrétisé en éléments de taille Δt . Le schéma le plus simple pour approximer cette équation est le schéma **d'Euler** qui s'écrit

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = f(u^n)$$

Cette approximation est dite **explicite** car la fonction f est évaluée avec la grandeur u à l'instant précédent (itération n). L'avantage principal de ces méthodes est qu'elles conduisent à une relation explicite sur la grandeur recherchée u^{n+1} . En contrepartie, le fait de prendre l'information au temps précédent impose de respecter une condition sur le pas de temps Δt qui doit être suffisamment petit pour éviter des instabilités.

Lorsque la fonction f est évaluée avec la variable à l'itération $n+1$, l'on parle alors de schéma **implicite** dont le plus simple (Euler implicite) s'écrit :

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = f(u^{n+1})$$

La relation n'est plus explicite cette fois, ce qui conduit à résoudre numériquement une équation. Si u est un vecteur⁴¹, il est nécessaire d'inverser un système. Ce coût calcul important est généralement compensé par l'absence – théorique – de critère de stabilité permettant une plus grande liberté dans

41. C'est notre cas ici même quand la grandeur est scalaire comme la pression puisqu'il faut traiter simultanément toutes les inconnues $p_{i,j,k}$ ce qui conduit à un vecteur de taille $N_x \times N_y \times N_z$.

le choix du pas de temps.

Les deux schémas présentés sont d'ordre un en temps (i.e., l'erreur de discrétisation ne décroît que proportionnellement au pas de temps) et il est généralement préférable de privilégier des schémas plus précis qui soient au moins d'ordre deux. Ainsi, pour l'intégration de la position des particules ou du terme convectif des équations de Navier-Stokes, nous utilisons un schéma explicite d'**Adams-Bashforth** à deux pas qui est d'ordre deux et s'écrit :

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \frac{3}{2}f(u^n) - \frac{1}{2}f(u^{n-1})$$

Ces méthodes sont dites à pas multiples (ici, deux pas) puisqu'elles cherchent à gagner en précision en utilisant les informations des itérations précédentes. Ceci diffère d'autres techniques, tel le **Runge-Kutta**, qui prennent des points intermédiaires au sein du pas de temps courant (par exemple au demi-pas $n+1/2$) afin de gagner en précision sans utiliser les informations des itérations précédentes. Nous avons privilégié un Adams-Bashforth qui s'avère plus rapide, à même précision, qu'un Runge-Kutta.

Dans les équations de Navier-Stokes, les termes diffusifs sont intégrés de manière implicite afin de s'affranchir de pas de temps réducteurs liés au critère de stabilité (de l'ordre de Δ^2/ν et donc particulièrement contraignants dans les écoulements traités). A l'ordre deux, le schéma implicite choisi est le schéma de **Crank-Nicolson** qui est en fait la moyenne d'un schéma Euler explicite et Euler implicite. Il s'écrit ainsi

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(f(u^{n+1}) + f(u^n) \right)$$

Ce choix est très classique pour les équations elliptiques telles que les équations de diffusion.

A.2 Schéma semi-lagrangien

Ce choix de schéma s'est imposé lors de la résolution du problème de transport du terme de forçage λ . Il s'agit de traiter une simple équation d'advection de type

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla f = 0 \quad (\text{A.1})$$

avec \mathbf{U} la vitesse constante.

Nous avons souligné que les méthodes testées, bien que classiques, s'étaient avérées peu satisfaisantes et que l'approche la plus précise était obtenue par l'emploi d'une classe de schéma semi-lagrangien. Ces schémas sont principalement utilisés en météorologie (Bermejo et Staniforth, 1992; Huang, 1994; Staniforth et Côté, 1991) où ils permettent l'emploi de pas de temps assez importants sans perte de précision.

L'idée est de réécrire Eq. (A.1) sous forme lagrangienne :

$$\frac{Df}{Dt} = 0$$

avec D/Dt la dérivée totale. Ceci signifie que la quantité f se conserve sur une caractéristique définie par :

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{U}$$

Le schéma semi-lagrangien s'écrit alors simplement :

$$f(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f(\mathbf{x} - \mathbf{U}\Delta t, t) \quad (\text{A.2})$$

Dit autrement, cette méthode consiste simplement à calculer la grandeur au temps $t + \Delta t$ en interpolant sa valeur à la position $\mathbf{x} - \mathbf{U}\Delta t$.

Le choix de la méthode d'interpolation gouverne la précision du schéma. Ces méthodes semi-lagrangiennes sont particulièrement bien adaptées aux maillages cartésiens (comme dans notre cas) qui facilitent grandement la phase d'interpolation. Il est possible d'utiliser une interpolation linéaire⁴², simple, rapide mais peu précise. Il est ainsi généralement préférable d'avoir recours à des interpolations plus précises par exemple via des polynômes de Lagrange.

Si l'on considère $n + 1$ points distincts $(x_0, f_0), \dots, (x_n, f_n)$, le polynôme de Lagrange est l'unique polynôme de plus petit degré (en l'occurrence n) passant par tous ces points. Il s'écrit :

$$L(X) = \sum_{j=0}^n f_j \left(\prod_{i=0, i \neq j}^n \frac{X - x_i}{x_j - x_i} \right) \quad (\text{A.3})$$

Un ordre n élevé est évidemment plus précis mais entraîne un coût calcul augmentant très notablement. Nous avons testé des interpolations quadratiques, cubiques ou quartiques (respectivement $n=2, 3$ ou 4) mais notre compromis précision/complexité s'est porté sur une interpolation quadratique ($n=2$) s'appuyant donc sur $n + 1 = 3$ points dans chaque dimension pour interpoler une valeur.

A.3 Gradient conjugué et préconditionnement

Le problème de lubrification conduit à la résolution d'un système linéaire de type $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ où la matrice \mathbf{A} est symétrique, définie, positive et creuse (*sparse*), ce qui légitime une approche itérative de type gradient conjugué. Ces techniques itératives sont très efficaces dès lors que la matrice à inverser est bien conditionnée. Le conditionnement κ d'une matrice \mathbf{A} est défini par le rapport entre ses valeurs propres extrêmes $\kappa = |\lambda_{\max}/\lambda_{\min}|$. Lorsque ce conditionnement est très grand (ce qui est le cas pour le problème de lubrification), les performances du gradient conjugué se dégradent. A l'itération k , l'erreur $\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}\|$ est majorée par

$$\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}\| \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}\| \quad (\text{A.4})$$

Ainsi, lorsque κ devient très grand, le terme entre parenthèses tend vers 1 et l'erreur ne décroît quasiment plus avec les itérations : le nombre d'itérations nécessaire pour converger le système devient très important. Il est alors utile de recourir à un préconditionnement du système. L'idée du préconditionnement consiste à multiplier le système par une matrice \mathbf{P}^{-1} judicieusement choisie, soit le nouveau système à résoudre :

$$\mathbf{P}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1} \cdot \mathbf{b} \quad (\text{A.5})$$

La matrice \mathbf{P} doit être simple à inverser et « proche » de \mathbf{A} de manière à retrouver une matrice $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}$ mieux conditionnée. Un préconditionnement diagonal revient à fixer $\mathbf{P} = \text{diag}(\mathbf{A})$, un choix simple mais malheureusement peu efficace pour notre problème de lubrification. Une option plus pertinente consiste à considérer la factorisation de Choleski incomplète IC(0) de \mathbf{A} . Une factorisation de Choleski complète est une matrice triangulaire inférieure \mathbf{L} telle que $\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L}^T$. Par contre, si \mathbf{A} est creuse alors \mathbf{L} ne l'est pas d'où un coût calcul rédhibitoire. L'idée de la factorisation incomplète IC(0) est de ne déterminer les termes de \mathbf{L} uniquement qu'aux endroits où les termes de \mathbf{A} sont non-nuls. On conserve ainsi la même structure que la matrice d'origine pour un coût calcul limité.

42. Ou plus exactement trilinéaire car il est nécessaire d'interpoler un point dans les trois directions de l'espace.

Pour améliorer encore les performances du gradient conjugué préconditionné, une renumérotation de la matrice à inverser A est effectuée grâce à un algorithme RCM (Reverse Cuthill-McKee). L'objectif de cette renumérotation est de réduire la largeur de bande de la matrice ce qui améliore les performances du préconditionnement. La Fig. A.1 illustre graphiquement cette renumérotation. La figure de gauche représente un exemple de matrice originale issue d'un problème de lubrification et chacun des points violets correspond à un terme non-nul de cette matrice. Après renumérotation, la matrice est réagencée avec une largeur de bande réduite.

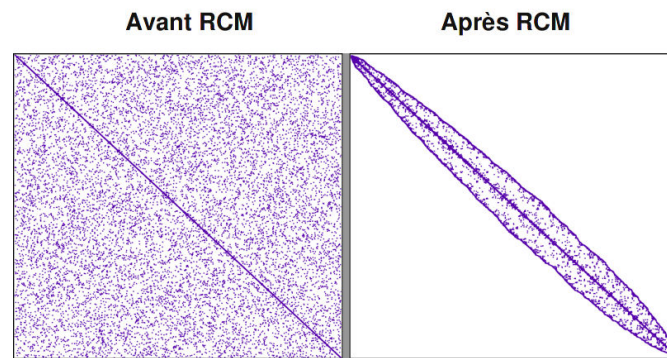


Fig. A.1 – Effet de l'algorithme RCM sur la structure d'une matrice de lubrification.

L'intérêt du préconditionnement et du réagencement de la matrice sur la performance du gradient conjugué est illustré sur la Fig. A.2. Ce graphique décrit l'évolution de la convergence du gradient conjugué en traçant l'erreur en fonction de l'itération pour un problème de lubrification à 2438 particules. La courbe rouge est le gradient conjugué non préconditionné : la convergence est lente et erratique et il faut près de 8000 itérations pour converger le système à une tolérance de 10^{-9} . En préconditionnant par un Choleski IC(0) (courbe bleue), il ne faut plus qu'environ 25 itérations. Ce nombre tombe à moins de 15 si l'on adjoint en plus la renumérotation RCM.

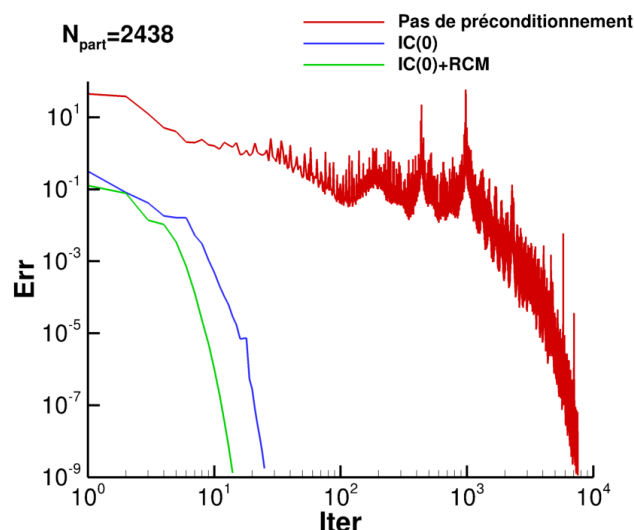


Fig. A.2 – Convergence du gradient conjugué avec et sans préconditionnement et RCM.

FONCTIONS DE RÉSISTANCE

Nous fournissons ici les expressions des fonctions de résistance utilisées dans ce travail. Elle sont issues de Kim et Karrila (1991) et Jeffrey et Onishi (1984) pour les fonctions A à G ; de Kim et Karrila (1991) pour les fonctions M et de Jeffrey *et al.* (1993) pour les fonctions P et Q . Ces expressions sont ici données pour deux particules sphériques 1 et 2, de même rayon a , séparées d'une distance $\|\mathbf{r}\|$ et l'on note ξ la distance réduite $\xi = (\|\mathbf{r}\| - 2a)/a$.

Approximation en champ proche

Dans le cas d'une distance réduite ξ petite, des développements asymptotiques sont connus et conduisent à des relations analytiques pour les fonctions de résistance qui sont les suivantes

$$\begin{aligned}
 \frac{X_{11}^A}{6\pi a} &= \frac{1}{4}\xi^{-1} + \frac{9}{40}\ln\xi^{-1} + \frac{3}{112}\xi\ln\xi^{-1} + 0,995 \\
 \frac{X_{12}^A}{6\pi a} &= -\frac{1}{4}\xi^{-1} - \frac{9}{40}\ln\xi^{-1} - \frac{3}{112}\xi\ln\xi^{-1} - 0,350 \\
 \frac{Y_{11}^A}{6\pi a} &= \frac{1}{6}\ln\xi^{-1} + 0,998 \\
 \frac{Y_{12}^A}{6\pi a} &= -\frac{1}{6}\ln\xi^{-1} - 0,274 \\
 \frac{Y_{11}^B}{4\pi a^2} &= -\frac{1}{4}\ln\xi^{-1} - \frac{1}{8}\xi\ln\xi^{-1} + 0,239 \\
 \frac{Y_{12}^B}{4\pi a^2} &= \frac{1}{4}\ln\xi^{-1} + \frac{1}{8}\xi\ln\xi^{-1} - 0,002 \\
 \frac{X_{11}^C}{8\pi a^3} &= -\frac{1}{8}\xi\ln\xi^{-1} + 1,052 \\
 \frac{X_{12}^C}{8\pi a^3} &= \frac{1}{8}\xi\ln\xi^{-1} - 0,150 \\
 \frac{Y_{11}^C}{8\pi a^3} &= \frac{1}{5}\ln\xi^{-1} + \frac{47}{250}\xi\ln\xi^{-1} + 0,703 \\
 \frac{Y_{12}^C}{8\pi a^3} &= \frac{1}{20}\ln\xi^{-1} + \frac{31}{500}\xi\ln\xi^{-1} - 0,027
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{X_{11}^G}{4\pi a^2} &= \frac{3}{8}\xi^{-1} + \frac{27}{80}\ln\xi^{-1} + \frac{117}{560}\xi\ln\xi^{-1} - 0,469 \\
\frac{X_{12}^G}{4\pi a^2} &= -\frac{3}{8}\xi^{-1} - \frac{27}{80}\ln\xi^{-1} - \frac{117}{560}\xi\ln\xi^{-1} + 0,195 \\
\frac{Y_{11}^G}{4\pi a^2} &= \frac{1}{8}\ln\xi^{-1} + \frac{1}{16}\xi\ln\xi^{-1} - 0,142 \\
\frac{Y_{12}^G}{4\pi a^2} &= -\frac{1}{8}\ln\xi^{-1} - \frac{1}{16}\xi\ln\xi^{-1} + 0,103 \\
\frac{Y_{11}^H}{8\pi a^3} &= \frac{1}{40}\ln\xi^{-1} + \frac{137}{2000}\xi\ln\xi^{-1} - 0,074 \\
\frac{Y_{12}^H}{8\pi a^3} &= \frac{1}{10}\ln\xi^{-1} + \frac{113}{2000}\xi\ln\xi^{-1} - 0,030
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{X_{11}^M + X_{12}^M}{\frac{20}{3}\pi a^3} &= \frac{3}{10}\xi^{-1} + \frac{27}{100}\ln\xi^{-1} + 0,571 \\
\frac{Y_{11}^M + Y_{12}^M}{\frac{20}{3}\pi a^3} &= \frac{3}{20}\ln\xi^{-1} + 0,676 \\
\frac{Z_{11}^M + Z_{12}^M}{\frac{20}{3}\pi a^3} &= 0,9527 + 0,0914\xi
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{X_{11}^P}{4\pi a^2} &= \frac{3}{8}\xi^{-1} - \frac{9}{40}\ln\xi^{-1} - \frac{71}{560}\xi\ln\xi^{-1} - 0,0118 \\
\frac{X_{12}^P}{4\pi a^2} &= -\frac{3}{8}\xi^{-1} + \frac{9}{40}\ln\xi^{-1} + \frac{71}{560}\xi\ln\xi^{-1} - 0,1435 \\
\frac{X_{11}^Q}{4\pi a^2} &= \frac{3}{16}\xi^{-1} - \frac{9}{80}\ln\xi^{-1} - \frac{13}{224}\xi\ln\xi^{-1} - 0,0799 \\
\frac{X_{12}^Q}{4\pi a^2} &= \frac{3}{16}\xi^{-1} - \frac{9}{80}\ln\xi^{-1} - \frac{41}{224}\xi\ln\xi^{-1} + 0,1329
\end{aligned}$$

Approximation en champ intermédiaire

Les expressions précédentes ne sont valables que lorsque la distance ξ est petite, typiquement $\xi < 0,01$. Pour les distances assez grandes ($\xi \gtrsim 0,5$), il existe également des expressions de champ lointain décrites par un développement en puissances de $a/\|\mathbf{r}\|$. Ces expressions sont cependant inutiles ici puisque nous ne nous intéressons, dans le cadre de notre modèle de lubrification, qu'à des distances ξ comprises entre 0 et 0,2. Dans le domaine intermédiaire (typiquement entre 0,01 et 0,5), il n'y a pas d'expression analytique pour les fonctions des résistance. Il est donc choisi de les tabuler en s'appuyant sur des valeurs obtenues numériquement par une méthode de collocation⁴³. Les fonctions de résistance sont ainsi calculées numériquement pour différentes valeurs de ξ entre 0 et 0,3 et consignées dans un fichier qui sera lu par notre code en début de calcul. Lors de l'appel à la routine de calcul de lubrification, les fonctions de résistance pour une valeur ξ donnée sont estimées par interpolation linéaire des valeurs tabulées. Notons que les fonctions P et Q ne sont pas disponibles dans le code de Kim et la tabulation a été établie via les graphes extraits de l'article de Jeffrey *et al.* (1993).

43. Méthode de type *Boundary Collocation* basée sur les solutions générales de Lamb pour le problème à deux sphères (Kim et Karrila, 1991, p. 323). Les calculs ont été effectués sur la base de sources Fortran écrits par Kim et disponibles sur Internet (©Sangtae Kim, 1991).

Interactions paroi-particule

Les fonctions de résistance pour une particule près d'une paroi sont moins renseignées que pour les interactions particule-particule. Des développements en proche paroi peuvent en partie être trouvés dans Bossis *et al.* (1991) et Dance et Maxey (2003). Yeo et Maxey (2010b) proposent une compilation issue de la littérature et sur laquelle nous nous appuyons⁴⁴. Les fonctions répertoriées dans cette étude sont les suivantes :

$$\begin{aligned}
 \frac{X^A}{6\pi a} &= \xi^{-1} + \frac{1}{5} \ln \xi^{-1} + \frac{1}{21} \xi \ln \xi^{-1} + 0,8193 \\
 \frac{Y^A}{6\pi a} &= \frac{8}{15} \ln \xi^{-1} + \frac{64}{375} \xi \ln \xi^{-1} + 0,9557 \\
 \frac{Y^B}{4\pi a^2} &= -\frac{3}{15} \ln \xi^{-1} - \frac{43}{125} \xi \ln \xi^{-1} + 0,3852 \\
 \frac{X^C}{8\pi a^3} &= -\frac{1}{2} \xi \ln \xi^{-1} + 1,2021 \\
 \frac{Y^C}{8\pi a^3} &= \frac{2}{5} \ln \xi^{-1} + \frac{66}{125} \xi \ln \xi^{-1} + 0,3720 \\
 \frac{Y^G}{4\pi a^2} &= \frac{7}{10} \ln \xi^{-1} + \frac{221}{250} \xi \ln \xi^{-1} - 0,923 \\
 \frac{Y^H}{8\pi a^3} &= -\frac{1}{10} \ln \xi^{-1} + \frac{2}{250} \xi \ln \xi^{-1} + 0,0916
 \end{aligned}$$

Pour un cisaillement en paroi plane, les fonctions X^Q , X^M et Z^M sont inutiles car les termes géométriques associés sont identiquement nuls. Toutefois, il manque les fonctions X^G , Y^M et X^P qui, à notre connaissance, ne sont pas disponibles dans la littérature. Notons que les fonctions X^G et X^P ne sont utiles que lorsqu'une force extérieure s'applique sur la particule, ce qui sera le cas ici (forces de contact).

Pour obtenir ces trois fonctions manquantes, nous partons simplement des expressions théoriques pour deux particules de rayons a et βa différents, avec β le rapport de taille (Jeffrey, 1992; Kim et Karrila, 1991). Il suffit ensuite d'effectuer un changement de variable⁴⁵ puis de faire tendre le rapport de taille β vers l'infini dans l'expression obtenue. Le terme non-singulier en $\mathcal{O}(1)$ est tiré de Jeffrey (1992) pour $\beta = 100$ qui est la plus grande valeur disponible. Au final, les expressions asymptotiques que nous proposons sont

$$\begin{aligned}
 \frac{X^G}{4\pi a^2} &= \frac{3}{2} \xi^{-1} + \frac{6}{5} \ln \xi + 0,268 \\
 \frac{X^P}{4\pi a^2} &= \frac{3}{2} \xi^{-1} + \frac{6}{5} \ln \xi - 0,552 \\
 \frac{Y^M}{\frac{20}{3}\pi a^3} &= -\frac{24}{25} \ln \xi - \frac{1182}{625} \xi \ln \xi - 0,685
 \end{aligned}$$

Il n'existe pas de tabulation pour toutes ces fonctions de paroi dans le régime intermédiaire de distance. Les formulations asymptotiques précédentes seront donc utilisées dans tous les cas.

44. Notons toutefois dans cet article un copier-coller malheureux sur le terme $\mathcal{O}(1)$ de Y^H .

45. L'adimensionnement de la distance est en effet donné par la moyenne des rayons $a(1+\beta)/2$ alors que l'on souhaite ici conserver un adimensionnement par a pour une interaction particule-paroi.

BIBLIOGRAPHIE

- Abbas, M. (2008). *Auto-diffusion de particules dans un écoulement cisailé : des interactions hydrodynamiques aux effets collisionnels*. Ph. D. thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- Abbas, M., E. Climent, O. Simonin, et M. Maxey (2006). Dynamics of bidisperse suspensions under Stokes flows : Linear shear flow and sedimentation. *Physics of Fluids* 18, 121504.
- Ackerson, B. (1990). Shear induced order and shear processing of model hard sphere suspensions. *Journal of rheology* 34(4), 553–590.
- Ancey, C., P. Vollmöller, et S. Cochard (2005). Rhéophysique des suspensions concentrées : cadre théorique et similitude. *17ème congrès français de Mécanique*.
- Apte, S., M. Martin, et N. Patankar (2009). A numerical method for fully resolved simulation (FRS) of rigid particle-flow interactions in complex flows. *Journal of Computational Physics* 228(8), 2712–2738.
- Arp, P. et S. Mason (1977). The kinetics of flowing dispersions : Viii. doublets of rigid spheres (theoretical). *Journal of colloid and interface science* 61(1), 21–43.
- Azoug, A. (2010). *Micromécanismes et comportement macroscopique d'un élastomère fortement chargé*. Ph. D. thesis, Ecole Polytechnique.
- Ball, R. et J. Melrose (1995). Lubrication breakdown in hydrodynamic simulations of concentrated colloids. *Advances in colloid and interface science* 59, 19–30.
- Ballereau, S. (2002). Influence du procédé de mise en oeuvre sur la réponse balistique des moteurs à propergol solide. *Revue Scientifique et Technique de la Défense* 57.
- Barnes, H. (1997). Thixotropy—a review. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 70(1-2), 1–33.
- Barnes, H., J. Hutton, et K. Walters (1989). *An introduction to rheology*, Volume 3. Elsevier Science.
- Batchelor, G. (1970). The stress system in a suspension of force-free particles. *Journal of Fluid Mechanics* 41(03), 545–570.
- Batchelor, G. (1972). Sedimentation in a dilute dispersion of spheres. *Journal of fluid mechanics* 52(02), 245–268.
- Batchelor, G. (1977). The effect of brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics* 83(01), 97–117.
- Batchelor, G. et J. Green (1972a). The determination of the bulk stress in a suspension of spherical particles to order c^2 . *Journal of Fluid Mechanics* 56(03), 401–427.
- Batchelor, G. et J. Green (1972b). The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field. *Journal of Fluid Mechanics* 56(02), 375–400.
- Beaume, G. (2008). *Modélisation et Simulation Numérique Directe de l'Écoulement d'un Fluide Complexe*. Ph. D. thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

- Beckman, C. et R. Geisler (1982). Ballistic anomaly trends in subscale solid rocket motors. *AIAA Paper 82-1092*.
- Beckstead, M. (2000). Overview of combustion mechanisms and flame structures for advanced solid propellants. *Solid propellant chemistry, combustion, and motor interior ballistics* 185, 267–286.
- Bermejo, R. et A. Staniforth (1992). The conversion of semi-Lagrangian advection schemes to quasi-monotone schemes. *Monthly Weather Review* 120(11), 2622–2632.
- Bico, J., R. Welsh, et G. McKinley (2012). Non-newtonian fluid dynamics research group, mit. <http://web.mit.edu/nnf/research/phenomena/rodclimbing.html/>. [accessible mars 2012].
- Blanc, F. (2011). *Rhéologie et microstructure des suspensions concentrées non-browniennes*. Ph. D. thesis, Université de Nice-Sophia Antipolis.
- Blanc, F., F. Peters, et E. Lemaire (2011). Experimental signature of the pair trajectories of rough spheres in the shear-induced microstructure in noncolloidal suspensions. *Physical review letters* 107(20), 208302.
- Blanc, R., M. Belzons, C. Camoin, et J. Bouillot (1983). Cluster statistics in a bidimensional suspension : comparison with percolation. *Rheologica acta* 22(5), 505–511.
- Blasco, J., M. Calzada, et M. Marín (2009). A Fictitious Domain, parallel numerical method for rigid particulate flows. *Journal of Computational Physics* 228(20), 7596–7613.
- Bossis, G. et J. Brady (1984). Dynamic simulation of sheared suspensions. I. General method. *The Journal of Chemical Physics* 80, 5141.
- Bossis, G., A. Meunier, et J. Brady (1991). Hydrodynamic stress on fractal aggregates of spheres. *Journal of Chemical Physics* 94(7), 5064–5070.
- Boyer, F., E. Guazzelli, et O. Pouliquen (2011). Unifying suspension and granular rheology. *Physical Review Letters* 107(18), 188301.
- Boyer, F., O. Pouliquen, et E. Guazzelli (2011). Dense suspensions in rotating-rod flows : normal stresses and particle migration. *Journal of Fluid Mechanics* 1(1), 1–21.
- Brady, J. et G. Bossis (1985). The rheology of concentrated suspensions of spheres in simple shear flow by numerical simulation. *Journal of Fluid Mechanics* 155, 105–129.
- Brady, J. et G. Bossis (1988). Stokesian dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics* 20(1), 111–157.
- Brady, J. et J. Morris (1997). Microstructure of strongly sheared suspensions and its impact on rheology and diffusion. *Journal of Fluid Mechanics* 348, 103–139.
- Bretherton, F. (1962). The motion of rigid particles in a shear flow at low Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics* 14(02), 284–304.
- Bricker, J. et J. Butler (2006). Oscillatory shear of suspensions of noncolloidal particles. *Journal of rheology* 50(5), 711–728.
- Bricker, J. et J. Butler (2007). Correlation between stresses and microstructure in concentrated suspensions of non-brownian spheres subject to unsteady shear flows. *Journal of rheology* 51(4), 735–759.
- Briggs, W. et S. McCormick (2000). *A multigrid tutorial*. Society for Industrial Mathematics.

- Campbell, G. et G. Forgacs (1990). Viscosity of concentrated suspensions : An approach based on percolation theory. *Physical review A* 41(8), 4570.
- Carlson, M., P. Mucha, et G. Turk (2004). Rigid fluid : animating the interplay between rigid bodies and fluid. *ACM Transactions on Graphics (TOG)* 23(3), 377–384.
- Ce-Wen, N. (1993). Physics of inhomogeneous inorganic materials. *Progress in Materials Science* 37(1), 1–116.
- Chaminade, S. (2006). *Déplacement et organisation de micro-bulles dans un fluide fortement chargé simulant un propergol à l'état pâteux*. Ph. D. thesis, Université de Bordeaux.
- Chang, C. et R. Powell (1993). Dynamic simulation of bimodal suspensions of hydrodynamically interacting spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics* 253, 1–25.
- Chang, C. et R. Powell (1994a). Effect of particle size distributions on the rheology of concentrated bimodal suspensions. *Journal of rheology* 38(1), 85–98.
- Chang, C. et R. Powell (1994b). The rheology of bimodal hard-sphere dispersions. *Physics of Fluids* 6, 1628.
- Chen, S. et G. Doolen (2003). Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annual Review of Fluid Mechanics* 30(1), 329.
- Chorin, A. (1968). Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation* 22(104), 745–762.
- Chounet, G., C. Marraud, E. Giraud, et P. Carrasquet (2000). A5 propellant suspension : rheology control and particle migration during casting. Dans *Space Propulsion Conference, Rome*.
- Chow, A., S. Sinton, J. Iwamiya, et T. Stephens (1994). Shear-induced particle migration in couette and parallel-plate viscometers : Nmr imaging and stress measurements. *Physics of Fluids* 6, 2561.
- Cichocki, B., M. Ekiel-Jezewska, et E. Wajnryb (1999). Lubrication corrections for three-particle contribution to short-time self-diffusion coefficients in colloidal dispersions. *The Journal of Chemical Physics* 111, 3265.
- Claeys, I. L. et J. F. Brady (1989). Lubrication singularities of the grand resistance tensor for two arbitrary particles. *PCH Phys.-Chem. Hydr.* 11(3), 261–293.
- Claeys, I. L. et J. F. Brady (1993). Suspensions of prolate spheroids in Stokes flow. Part 1. Dynamics of a finite number of particles in an unbounded fluid. *Journal of Fluid Mechanics* 251, 411–411.
- Climent, E. et M. Maxey (2003). Numerical simulations of random suspensions at finite Reynolds numbers. *International Journal of Multiphase Flow* 29(4), 579–601.
- Coquerelle, M. et G. Cottet (2008). A vortex level set method for the two-way coupling of an incompressible fluid with colliding rigid bodies. *Journal of Computational Physics* 227(21), 9121–9137.
- Corte, L., P. Chaikin, J. Gollub, et D. Pine (2008). Random organization in periodically driven systems. *Nature Physics* 4(5), 420–424.
- Coussot, P. et C. Ancey (1999a). Rheophysical classification of concentrated suspensions and granular pastes. *Physical Review E* 59(4), 4445.
- Coussot, P. et C. Ancey (1999b). *Rhéophysique des pâtes et des suspensions*. EDP Sciences.

- Couturier, É., F. Boyer, O. Pouliquen, et E. Guazzelli (2011). Suspensions in a tilted trough : second normal stress difference. *Journal of Fluid Mechanics* 10, 26–39.
- Cundall, P. et O. Strack (1979). A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique* 29(1), 47–65.
- DaCunha, F. et E. Hinch (1996). Shear-induced dispersion in a dilute suspension of rough spheres. *Journal of Fluid Mechanics* 309, 211–223.
- Dai, S., E. Bertevas, F. Qi, et R. Tanner (2013). Viscometric functions for noncolloidal sphere suspensions with newtonian matrices. *Journal of Rheology* 57(2), 493–510.
- Dance, S., E. Climent, et M. Maxey (2004). Collision barrier effects on the bulk flow in a random suspension. *Physics of Fluids* 16, 828.
- Dance, S. et M. Maxey (2003). Incorporation of lubrication effects into the force-coupling method for particulate two-phase flow. *Journal of Computational Physics* 189(1), 212–238.
- Dasan, J., T. Ramamohan, A. Singh, et P. Nott (2002). Stress fluctuations in sheared stokesian suspensions. *Physical Review E* 66(2), 021409.
- D’Avino, G. et M. Hulsen (2010). A comparison between a collocation and weak implementation of the rigid-body motion constraint on a particle surface. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 64, 1014–1040.
- Davis, R., Y. Zhao, K. Galvin, et H. Wilson (2003). Solid–solid contacts due to surface roughness and their effects on suspension behaviour. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 361(1806), 871–894.
- Dbouk, T. (2011). *Rhéologie des suspensions concentrées et migration des particules induite par un écoulement*. Ph. D. thesis, Université de Nice-Sophia Antipolis.
- Dbouk, T., L. Lobry, et E. Lemaire (2013). Normal stresses in concentrated non-brownian suspensions. *Journal of Fluid Mechanics* 715, 239–272.
- De Araujo, F. et H. Rosenberg (1976). Switching behaviour and dc electrical conductivity of epoxy-resin/metal-powder composites. *Journal of Physics D : Applied Physics* 9(6), 1025–1030.
- De Gennes, P. (1979). Conjectures on the transition from poiseuille to plug flow in suspensions. *Journal de Physique* 40(8), 783–787.
- Deepak, D., R. Jeenu, P. Sridharan, et M. Padmanabhan (2001). Direct evidence of spatial burning rate variation as cause of midweb anomaly. *Journal of Propulsion and Power* 17(2), 449–452.
- Dratler, D. et W. Schowalter (1996). Dynamic simulation of suspensions of non-Brownian hard spheres. *Journal of Fluid Mechanics* 325(-1), 53–77.
- Drazer, G., J. Koplik, B. Khusid, et A. Acrivos (2002). Deterministic and stochastic behaviour of non-brownian spheres in sheared suspensions. *Journal of Fluid Mechanics* 460(1), 307–335.
- Drazer, G., J. Koplik, B. Khusid, et A. Acrivos (2004). Microstructure and velocity fluctuations in sheared suspensions. *Journal of Fluid Mechanics* 511, 237–263.
- Durlofsky, L., J. Brady, et G. Bossis (1987). Dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles. *Journal of Fluid Mechanics* 180, 21–49.

- Eilers, H. (1941). The viscosity of emulsions made of highly viscous materials as a function of the concentration. *Kolloid Zeitschrift* (97), 313–321.
- Einstein, A. (1906). Zur theorie der brownischen bewegung. *Annalen der physik* 324(2), 371–381.
- Ekiel-Jezewska, M., F. Feuillebois, N. Lecoq, K. Masmoudi, R. Anthore, F. Bostel, et E. Wajnryb (1999). Hydrodynamic interactions between two spheres at contact. *Physical Review E* 59(3), 3182.
- Eral, H., D. van den Ende, F. Mugele, et M. Duits (2009). Influence of confinement by smooth and rough walls on particle dynamics in dense hard-sphere suspensions. *Physical Review E* 80(6), 061403.
- Fang, Z., A. Mammoli, J. Brady, M. Ingber, L. Mondy, et A. Graham (2002). Flow-aligned tensor models for suspension flows. *International journal of multiphase flow* 28(1), 137–166.
- Farris, R. (1968). Prediction of the viscosity of multimodal suspensions from unimodal viscosity data. *Transactions of the Society of Rheology* 12(2), 281–301.
- Feng, J., H. Hu, et D. Joseph (1994). Direct simulation of initial value problems for the motion of solid bodies in a Newtonian fluid Part 1. Sedimentation. *Journal of Fluid Mechanics* 261, 95–134.
- Feng, Y., K. Han, et D. Owen (2010). Combined three-dimensional lattice Boltzmann method and discrete element method for modelling fluid–particle interactions with experimental assessment. *International journal for numerical methods in engineering* 81(2), 229–245.
- Feng, Z. et E. Michaelides (2005). Proteus : a direct forcing method in the simulations of particulate flows. *Journal of Computational Physics* 202(1), 20–51.
- Fogelzang, A., A. Denisyuk, V. Serushkin, V. Y. Egorshv, V. Sinditskii, et A. Margolin (2000). Burning behavior of composite propellants with fast-burning inclusions. *Journal of Propulsion and Power* 16(2), 374–376.
- Foss, D. et J. Brady (2000). Structure, diffusion and rheology of brownian suspensions by stokesian dynamics simulation. *Journal of Fluid Mechanics* 407(167-200), 166.
- Friedlander, M. et F. Jordan (1984). Radial variation of burning rate in center perforated grains. *AIAA Paper* 84-1442.
- Frolov, Y. et A. Pivkina (2007). High energy condensed systems. Dans *EuroPyro Conference, Beaune, France*.
- Frolov, Y. V. et A. Pivkina (1997). Fractal structure and features of energy-release (combustion) processes in heterogeneous condensed systems. *Combustion, explosion, and shock waves* 33(5), 513–527.
- Gadala-Maria, F. et A. Acrivos (1980). Shear-induced structure in a concentrated suspension of solid spheres. *Journal of Rheology* 24, 799.
- Gallier, S. (2003). Modèles globaux pour la prédiction des vitesses de combustion. Technical report, Rapport Interne SNPE.
- Gallier, S. (2010). Numerical modeling of dielectric breakdown in solid propellant microstructures. *International Journal for Multiscale Computational Engineering* 8(5).
- Gallier, S. et F. Godfroy (2009). Aluminum Combustion Driven Instabilities in Solid Rocket Motors. *Journal of Propulsion and Power* 25(2).

- Gallier, S. et J. Guery (2009). Regression fronts in random sphere packs : Application to composite solid propellant burning rate. *Proceedings of the Combustion Institute* 32(2), 2115–2122.
- Gallier, S. et F. Hiernard (2008). Microstructure of composite propellants using simulated packings and x-ray tomography. *Journal of propulsion and power* 24(1), 154–157.
- Ganatos, P., R. Pfeffer, et S. Weinbaum (1978). A numerical-solution technique for three-dimensional stokes flows, with application to the motion of strongly interacting spheres in a plane. *Journal of Fluid Mechanics* 84(01), 79–111.
- Ganatos, P., S. Weinbaum, et R. Pfeffer (1982). Gravitational and zero-drag motion of a sphere of arbitrary size in an inclined channel at low reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics* 124, 27–43.
- Garland, S., G. Gauthier, J. Martin, et J. Morris (2012). Normal stress measurements in sheared non-brownian suspensions. *Journal of Rheology* 57(1), 71–88.
- Giraud, E., C. G. et J. Tauzia (1997). Apports de la rhéologie et la simulation numérique à la mise au point des procédés de fabrication. *Revue Scientifique et Technique de la Défense* 3, 107–117.
- Glowinski, R., T. Pan, T. Hesla, et D. Joseph (1999). A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow* 25(5), 755–794.
- Glowinski, R., T. Pan, T. Hesla, D. Joseph, et J. Periaux (2001). A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies : application to particulate flow. *Journal of Computational Physics* 169(2), 363–426.
- Glowinski, R., T. Pan, et J. Periaux (1998). Distributed Lagrange multiplier methods for incompressible viscous flow around moving rigid bodies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 151(1-2), 181–194.
- Gondret, P., M. Lance, et L. Petit (2002). Bouncing motion of spherical particles in fluids. *Physics of Fluids* 14, 643.
- Gondret, P. et L. Petit (1996). Viscosity of periodic suspensions. *Physics of Fluids* 8, 2284.
- Gondret, P. et L. Petit (1997). Dynamic viscosity of macroscopic suspensions of bimodal sized solid spheres. *Journal of rheology* 41(6), 1261–1274.
- Grinchuk, P. et O. Rabinovich (2004). Percolation phase transition in combustion of heterogeneous mixtures. *Combustion, Explosion, and Shock Waves* 40(4), 408–418.
- Guazzelli, E., J. Morris, et S. Pic (2011). *A Physical Introduction to Suspension Dynamics*, Volume 45. Cambridge University Press.
- Guery, J., I. Chang, T. Shimada, M. Glick, D. Boury, E. Robert, J. Napior, R. Wardle, C. Pérut, et M. Calabro (2010). Solid propulsion for space applications : An updated roadmap. *Acta Astronautica* 66(1), 201–219.
- Guyon, É. et J.-P. Troadec (1994). *Du sac de billes au tas de sable*. Odile Jacob.
- Hampton, R., A. Mammoli, A. Graham, N. Tetlow, et S. Altobelli (1997). Migration of particles undergoing pressure-driven flow in a circular conduit. *Journal of rheology* 41, 621.
- Han, M., C. Kim, M. Kim, et S. Lee (1999). Particle migration in tube flow of suspensions. *Journal of rheology* 43, 1157.

- Hardy, J., Y. Pomeau, et O. De Pazzis (1973). Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions. *Journal of Mathematical Physics* 14, 1746.
- Harlow, F., J. Welch, *et al.* (1965). Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of fluids* 8(12), 2182.
- Harten, A., B. Engquist, S. Osher, et S. Chakravarthy (1987). Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III. *Journal of Computational Physics* 71(2), 231–303.
- Havlin, S. (2014). Lectures on percolation : Theory and applications. <http://havlin.biu.ac.il/course3.php>. [accessible mai 2014].
- Heaney, M. B. (1997). Electrical transport measurements of a carbon-black/polymer composite. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* 241(1), 296–300.
- Heister, S. (1993). Ballistics of solid rocket motors with spatial burning rate variations. *Journal of Propulsion Power* 9, 649–651.
- Hertz, H. (1882). Über die Berührung fester elastischer Körper. *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 92.
- Hertzsch, J.-M., F. Spahn, et N. V. Brilliantov (1995). On low-velocity collisions of viscoelastic particles. *Journal de Physique II* 5(11), 1725–1738.
- Hirt, C. et B. Nichols (1981). Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics* 39(1), 201–225.
- Hu, H. (1996). Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures. *International Journal of Multiphase Flow* 22(2), 335–352.
- Hu, H., D. Joseph, et M. Crochet (1992). Direct simulation of fluid particle motions. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 3(5), 285–306.
- Hu, H., N. Patankar, et M. Zhu (2001). Direct numerical simulations of fluid-solid systems using the arbitrary Lagrangian-Eulerian technique. *Journal of Computational Physics* 169(2), 427–462.
- Huang, C. (1994). Semi-Lagrangian advection schemes and Eulerian WKL algorithms. *Monthly Weather Review* 122(7), 1647–1658.
- Huang, N., G. Ovarlez, F. Bertrand, S. Rodts, P. Coussot, et D. Bonn (2005). Flow of wet granular materials. *Physical review letters* 94(2), 28301.
- Husband, D. et F. Gadala-Maria (1987). Anisotropic particle distribution in dilute suspensions of solid spheres in cylindrical couette flow. *Journal of Rheology* 31(1), 95–110.
- Hwang, W. et M. Hulsen (2006). Toward the computational rheometry of filled polymeric fluids. *Korea-Australia Rheology Journal* 18(4), 171–181.
- Hwang, W., M. Hulsen, et H. Meijer (2004). Direct simulations of particle suspensions in a viscoelastic fluid in sliding bi-periodic frames. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 121(1), 15–33.
- Jana, S., B. Kapoor, et A. Acrivos (1995). Apparent wall slip velocity coefficients in concentrated suspensions of noncolloidal particles. *Journal of Rheology (1978-present)* 39(6), 1123–1132.
- Janela, J., A. Lefebvre, et B. Maury (2005). A penalty method for the simulation of fluid-rigid body interaction. Dans *ESAIM Proceedings*, Volume 14, pp. 115–123.

- Jánosi, I., T. Tél, D. Wolf, et J. Gallas (1997). Chaotic particle dynamics in viscous flows : The three-particle stokeslet problem. *Physical Review E* 56(3), 2858.
- Jeffrey, D. (1992). The calculation of the low Reynolds number resistance functions for two unequal spheres. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 4, 16.
- Jeffrey, D., J. Morris, et J. Brady (1993). The pressure moments for two rigid spheres in low-reynolds-number flow. *Physics of Fluids A* 5(10), 2317–2325.
- Jeffrey, D. et Y. Onishi (1984). Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal rigid spheres in low-Reynolds-number flow. *Journal of Fluid Mechanics* 139(1), 261–290.
- Johnson, A. et T. Tezduyar (1996). Simulation of multiple spheres falling in a liquid-filled tube. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 134(3-4), 351–373.
- Johnson, A. A. et T. E. Tezduyar (1997). 3d simulation of fluid-particle interactions with the number of particles reaching 100. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 145(3), 301–321.
- Kallmeyer, T. et L. Sayer (1982). Differences between actual and predicted pressure-time histories of solid rocket motors. *AIAA Paper 82-1094*.
- Kalyon, D., P. Yaras, B. Aral, et U. Yilmazer (1993). Rheological behavior of a concentrated suspension : A solid rocket fuel simulant. *Journal of rheology* 37(1), 35–53.
- Karnis, A., H. Goldsmith, et S. Mason (1966). The flow of suspensions through tubes : V. inertial effects. *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 44(4), 181–193.
- Kerstein, A. R. (1987). Percolation model of polydisperse composite solid propellant combustion. *Combustion and flame* 69(1), 95–112.
- Kim, D. et H. Choi (2006). Immersed boundary method for flow around an arbitrarily moving body. *Journal of Computational Physics* 212(2), 662–680.
- Kim, S. et S. Karrila (1991). *Microhydrodynamics : principles and selected applications*, Volume 507. Butterworth-Heinemann Boston.
- Kitagawa, K., T. Shimada, H. Hasegawa, M. Fukunaga, H. Miyachi, et H. Kosuge (2011). Correlation of midweb anomaly with microstructure of composite propellant containing high amount of aluminum. Dans *47th AIAA Joint Propulsion Conference ; San Diego*.
- Koelman, J. et P. Hoogerbrugge (1993). Dynamic simulations of hard-sphere suspensions under steady shear. *EPL (Europhysics Letters)* 21, 363.
- Kolli, V., E. Pollauf, et F. Gadala-Maria (2002). Transient normal stress response in a concentrated suspension of spherical particles. *Journal of Rheology* 46, 321.
- Komnik, A., J. Harting, et H. Herrmann (2004). Transport phenomena and structuring in shear flow of suspensions near solid walls. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment* 2004(12), P12003.
- Koury, J. (1973). Solid strand burn rate technique for predicting full-scale motor performance. *Air Force Rocket Propulsion Lab, Rept. TR-73-49 30*.
- Krieger, I. et T. Dougherty (1959). A mechanism for non-newtonian flow in suspensions of rigid spheres. *Journal of Rheology* 3, 137.

- Krishnan, G., S. Beimfohr, et D. Leighton (1996). Shear-induced radial segregation in bidisperse suspensions. *Journal of Fluid Mechanics* 321, 371–394.
- Kromkamp, J., D. van den Ende, D. Kandhai, R. Van Der Sman, et R. Boom (2005). Shear-induced self-diffusion and microstructure in non-brownian suspensions at non-zero reynolds numbers. *Journal of fluid mechanics* 529(1), 253–278.
- Kromkamp, J., D. van den Ende, D. Kandhai, R. van der Sman, et R. Boom (2006). Lattice boltzmann simulation of 2d and 3d non-brownian suspensions in couette flow. *Chemical engineering science* 61(2), 858–873.
- Kubota, N. (2007). *Propellants and explosives : thermochemical aspects of combustion*. Wiley-Vch.
- Kulkarni, S. et J. Morris (2009). Ordering transition and structural evolution under shear in brownian suspensions. *Journal of Rheology* 53(2), 417–439.
- Labous, L., A. D. Rosato, et R. N. Dave (1997). Measurements of collisional properties of spheres using high-speed video analysis. *Physical review E* 56(5), 5717.
- Ladd, A. (1990). Hydrodynamic transport coefficients of random dispersions of hard spheres. *The Journal of Chemical Physics* 93, 3484.
- Ladd, A. (1994a). Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation. *Journal of Fluid Mechanics* 271, 285–309.
- Ladd, A. (1994b). Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 2. Numerical results. *Journal of Fluid Mechanics* 271, 311–339.
- Ladd, A. et R. Verberg (2001). Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. *Journal of Statistical Physics* 104(5), 1191–1251.
- Lakehal, D., M. Meier, et M. Fulgosi (2002). Interface tracking towards the direct simulation of heat and mass transfer in multiphase flows. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 23(3), 242–257.
- Le Breton, P. et D. Ribéreau (2002). Casting process impact on small-scale solid rocket motor ballistic performance. *Journal of propulsion and power* 18(6), 1211–1217.
- Lee, E., J. Denham, R. Miller, et P. Aiello (1989). *CPIA/JANAF Proceedings, Publication 527*.
- Lees, A. et S. Edwards (1972). The computer study of transport processes under extreme conditions. *Journal of Physics C : Solid State Physics* 5, 1921.
- Lefebvre, A. (2007a). Fluid-particle simulations with freefem++. Dans *ESAIM Proceedings*, Volume 18, pp. 120–132.
- Lefebvre, A. (2007b). *Modélisation numérique d'écoulements fluide/particules – Prise en compte des forces de lubrification*. Ph. D. thesis, Université Paris-Sud.
- Lefebvre, A. (2009). Numerical simulation of gluey particles. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 43(01), 53–80.
- Lefebvre, A. et B. Maury (2005). Apparent viscosity of a mixture of a Newtonian fluid and interacting particles. *Comptes Rendus Mécanique* 333(12), 923–933.
- Leighton, D. et A. Acrivos (1986). Viscous resuspension. *Chemical engineering science* 41(6), 1377–1384.

- Leighton, D. et A. Acrivos (1987). The shear-induced migration of particles in concentrated suspensions. *Journal of Fluid Mechanics* 181, 415–439.
- Lengelle, G., J. Duterque, et J. Trubert (2000). Physico-chemical mechanisms of solid propellant combustion. *Solid propellant chemistry, combustion, and motor interior ballistics* 185, 287–334.
- Lhuillier, D. (2009). Migration of rigid particles in non-brownian viscous suspensions. *Physics of Fluids* 21, 023302.
- Li, Z. et G. Drazer (2008). Hydrodynamic interactions in dissipative particle dynamics. *Physics of Fluids* 20, 103601.
- Liang, J. et Q. Yang (2007). Aggregate structure and percolation behavior in polymer/carbon black conductive composites. *Journal of Applied Physics* 102(8), 083508–083508.
- Liu, D., E. Keaveny, M. Maxey, et G. Karniadakis (2009). Force-coupling method for flows with ellipsoidal particles. *Journal of Computational Physics* 228(10), 3559–3581.
- Liu, X., S. Osher, et T. Chan (1994). Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of Computational Physics* 115(1), 200–212.
- Lombois, H., D. Lootens, J. Halary, P. Hébraud, P. Colombet, E. Lécolier, et H. Van Damme (2005). Sur le rôle ambigu de la lubrification dans la rhéologie des pâtes granulaires. *Rhéologie* 7, 11–21.
- Lomholt, S. et M. Maxey (2003). Force-coupling method for particulate two-phase flow : Stokes flow. *Journal of Computational Physics* 184(2), 381–405.
- Lomholt, S., B. Stenum, et M. Maxey (2002). Experimental verification of the force coupling method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow* 28(2), 225–246.
- Lyon, M. et L. Leal (1998). An experimental study of the motion of concentrated suspensions in two-dimensional channel flow. part 1. monodisperse systems. *Journal of Fluid Mechanics* 363, 25–56.
- Mammoli, A. (2002). Towards a reliable method for predicting the rheological properties of multiphase fluids. *Engineering analysis with boundary elements* 26(9), 747–755.
- Mammoli, A. (2006). The treatment of lubrication forces in boundary integral equations. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Science* 462(2067), 855.
- Mamunya, Y. P., V. Davydenko, P. Pissis, et E. Lebedev (2002). Electrical and thermal conductivity of polymers filled with metal powders. *European polymer journal* 38(9), 1887–1897.
- Mansouri, M., J. Delenne, M. El Youssoufi, et A. Seridi (2009). A 3D DEM-LBM approach for the assessment of the quick condition for sands. *Comptes Rendus Mécanique* 337(9-10), 675–681.
- Mari, R., R. Seto, J. Morris, et M. Denn (2014). Shear thickening, frictionless and frictional rheologies in non-brownian suspensions. *Accepté pour Journal of Rheology*.
- Martys, N. (2005). Study of a dissipative particle dynamics based approach for modeling suspensions. *Journal of Rheology* 49, 401.
- Matas, J., J. Morris, et E. Guazzelli (2004a). Inertial migration of rigid spherical particles in poiseuille flow. *Journal of Fluid Mechanics* 515(1), 171–195.
- Matas, J., J. Morris, et E. Guazzelli (2004b). Lateral forces on a sphere : Solid/liquid dispersions in drilling and production. *Oil & Gas Science and Technology* 59(1), 59–70.

- Matouš, K., H. Inglis, X. Gu, D. Rypl, T. Jackson, et P. H. Geubelle (2007). Multiscale modeling of solid propellants : From particle packing to failure. *Composites science and technology* 67(7), 1694–1708.
- Maury, B. (1997). A many-body lubrication model. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences-Series I-Mathematics* 325(9), 1053–1058.
- Maury, B. (1999). Direct simulations of 2D fluid-particle flows in bi-periodic domains. *Journal Of Computational Physics* 156(2), 325–351.
- Maxey, M. et B. Patel (2001). Localized force representations for particles sedimenting in stokes flow. *International Journal of Multiphase Flow* 27(9), 1603–1626.
- Melrose, J. et R. Ball (1995). The pathological behaviour of sheared hard spheres with hydrodynamic interactions. *EPL (Europhysics Letters)* 32, 535.
- Mély, H. (2011). *Modélisation de la transformation de biomatériaux par un modèle de percolation*. Ph. D. thesis, Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II.
- Merhi, D., E. Lemaire, G. Bossis, et F. Moukalled (2005). Particle migration in a concentrated suspension flowing between rotating parallel plates : Investigation of diffusion flux coefficients. *Journal of Rheology* 49(6), 1429–1448.
- Metzger, B. et J. Butler (2010). Irreversibility and chaos : Role of long-range hydrodynamic interactions in sheared suspensions. *Physical Review E* 82(5), 051406.
- Metzger, B. et J. Butler (2012). Clouds of particles in a periodic shear flow. *Physics of Fluids* 24, 021703.
- Metzger, B., P. Pham, et J. Butler (2013). Irreversibility and chaos : Role of lubrication interactions in sheared suspensions. *Physical Review E* 87(5), 052304.
- Metzger, B., O. Rahli, et X. Yin (2013). Heat transfer across sheared suspensions : role of the shear-induced diffusion. *Journal of Fluid Mechanics* 724, 527–552.
- Meunier, A. et G. Bossis (2008). The influence of surface forces on shear-induced tracer diffusion in mono and bidisperse suspensions. *The European Physical Journal E : Soft Matter and Biological Physics* 25(2), 187–199.
- Miller, R., E. Lee, et R. Powell (1991). Rheology of solid propellant dispersions. *Journal of rheology* 35(5), 901–920.
- Mills, P. (1985). Non-newtonian behaviour of flocculated suspensions. *Journal de Physique Lettres* 46(7), 301–309.
- Mills, P. et P. Snabre (1995). Rheology and structure of concentrated suspensions of hard spheres. shear induced particle migration. *Journal de Physique II* 5(10), 1597–1608.
- Mills, P. et P. Snabre (2009). Apparent viscosity and particle pressure of a concentrated suspension of non-brownian hard spheres near the jamming transition. *The European Physical Journal E : Soft Matter and Biological Physics* 30(3), 309–316.
- Mindlin, R. (1949). Compliance of elastic bodies in contact. *Journal of applied mechanics* 16, 259–268.
- Mittal, R. et G. Iaccarino (2005). Immersed boundary methods. *Annual Review of Fluid Mechanics* 37(1), 239.
- Moeendarbary, E., T. Ng, et M. Zangeneh (2010). Dissipative particle dynamics in soft matter and polymeric applications : a review. *International Journal of Applied Mechanics* 2(1), 161–190.

- Morris, J. (2009). A review of microstructure in concentrated suspensions and its implications for rheology and bulk flow. *Rheologica acta* 48(8), 909–923.
- Morris, J. et F. Boulay (1999). Curvilinear flows of noncolloidal suspensions : The role of normal stresses. *Journal of Rheology* 43, 1213.
- Morris, J. et J. Brady (1998). Pressure-driven flow of a suspension : Buoyancy effects. *International journal of multiphase flow* 24(1), 105–130.
- Muthiah, R., R. Manjari, V. Krishnamurthy, et B. Gupta (1993). Rheology of htpb propellant- effect of mixing speed and mixing time. *Defence Science Journal* 43(2), 167–172.
- Narumi, T., H. See, Y. Honma, T. Hasegawa, T. Takahashi, et N. Phan-Thien (2002). Transient response of concentrated suspensions after shear reversal. *Journal of Rheology* 46, 295.
- Nasser, S., N. Phan-Thien, et X. Fan (2000). Lubrication approximation in completed double layer boundary element method. *Computational Mechanics* 26(4), 388–397.
- Nguyen, D., R. Fedkiw, et M. Kang (2001). A Boundary Condition Capturing Method for Incompressible Flame Discontinuities. *Journal of Computational Physics* 172(1), 71–98.
- Nguyen, N. et A. Ladd (2002). Lubrication corrections for lattice-Boltzmann simulations of particle suspensions. *Physical Review E* 66(4), 046708.
- Nott, P. et J. Brady (1994). Pressure-driven flow of suspensions : simulation and theory. *Journal of Fluid Mechanics* 275, 157–199.
- Nott, P. R., E. Guazzelli, et O. Pouliquen (2011). The suspension balance model revisited. *Physics of Fluids* 23, 043304.
- Onoda, G. et E. Liniger (1990). Random loose packings of uniform spheres and the dilatancy onset. *Physical Review Letters* 64(22), 2727–2730.
- Osher, S. et R. Fedkiw (2001). Level Set Methods : An Overview and Some Recent Results. *Journal of Computational Physics* 169(2), 463–502.
- Osher, S. et J. Sethian (1988). Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics* 79(1), 12–49.
- Ouchiya, N. et T. Tanaka (1984). Porosity estimation for random packings of spherical particles. *Industrial & engineering chemistry fundamentals* 23(4), 490–493.
- Ovarlez, G., F. Bertrand, et S. Rodts (2006). Local determination of the constitutive law of a dense suspension of noncolloidal particles through magnetic resonance imaging. *Journal of Rheology* 50, 259.
- Pan, T. et R. Glowinski (2005). Direct simulation of the motion of neutrally buoyant balls in a three-dimensional poiseuille flow. *Comptes Rendus Mécanique* 333(12), 884–895.
- Parsi, F. et F. Gadala-Maria (1987). Fore-and-aft asymmetry in a concentrated suspension of solid spheres. *Journal of Rheology* 31(8), 725–32.
- Patankar, N. (2001). A formulation for fast computations of rigid particulate flows. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs 2001*, 185–196.
- Patankar, N. et H. Hu (2001). Rheology of a suspension of particles in viscoelastic fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 96(3), 427–443.

- Patankar, N. et H. Hu (2002). Finite Reynolds number effect on the rheology of a dilute suspension of neutrally buoyant circular particles in a Newtonian fluid. *International Journal of Multiphase Flow* 28(3), 409–425.
- Patankar, N., P. Singh, D. Joseph, R. Glowinski, et T. Pan (2000). A new formulation of the distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow* 26(9), 1509–1524.
- Perrin, A. et H. Hu (2008). An explicit finite difference scheme with spectral boundary conditions for particulate flows. *Journal of Computational Physics* 227(20), 8776–8791.
- Peskin, C. (1977). Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics* 25(3), 220–252.
- Peskin, C. (2002). The immersed boundary method. *Acta Numerica* 11, 479–517.
- Phan-Thien, N., K. Lee, et D. Tullock (2006). Large scale simulation of suspensions with PVM. Dans *Supercomputing, ACM/IEEE 1997 Conference*, pp. 60. IEEE.
- Phillips, R., R. Armstrong, R. Brown, A. Graham, et J. Abbott (1992). A constitutive equation for concentrated suspensions that accounts for shear-induced particle migration. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 4, 30.
- Phung, T., J. Brady, et G. Bossis (1996). Stokesian dynamics simulation of brownian suspensions. *Journal of Fluid Mechanics* 313, 181–207.
- Pine, D., J. Gollub, J. Brady, et A. Leshansky (2005). Chaos and threshold for irreversibility in sheared suspensions. *Nature* 438(7070), 997–1000.
- Plaud, M. et S. Gallier (2014). Simulation of heterogeneous propellant combustion : Effect of particle orientation and shape. *Proceedings of the Combustion Institute, sous presse [Septembre 2014]*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2014.05.020>.
- Popova, M., P. Vorobieff, M. Ingber, A. Graham, *et al.* (2007). Interaction of two particles in a shear flow. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics* 75(6), 066309.
- Portela, L. et R. Oliemans (2003). Eulerian-Lagrangian DNS/LES of particle-turbulence interactions in wall-bounded flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 43(9), 1045–1065.
- Pöschel, T. et T. Schwager (2005). *Computational granular dynamics : models and algorithms*. Springer.
- Press, W., S. Teukolsky, W. Vetterling, et B. Flannery (2007). Numerical recipes 3rd edition : The art of scientific computing.
- Probstein, R., M. Sengun, et T. Tseng (1994). Bimodal model of concentrated suspension viscosity for distributed particle sizes. *Journal of rheology* 38(4), 811–829.
- Radjai, F., V. Topin, V. Richefeu, C. Voivret, J.-Y. Delenne, E. Azéma, M. S. El Youssoufi, *et al.* (2010). Force transmission in cohesive granular media. *Mathematical Modeling and Physical Instances of granular Flows*, 240–260.
- Radjaï, F. et F. Dubois (2010). *Modélisation numérique discrète des matériaux granulaires (Série Géomatériaux, MIM)*. Lavoisier.

- Rampall, I., J. Smart, et D. Leighton (1997). The influence of surface roughness on the particle-pair distribution function of dilute suspensions of non-colloidal spheres in simple shear flow. *Journal of Fluid Mechanics* 339, 1–24.
- Ribereau, D., L. P. et S. Ballereau (2001). Casting process effect on composite solid propellant burning rate. Dans *37th AIAA Joint Propulsion Conference; Salt Lake City*.
- Richardson, J. et W. Zaki (1954). The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow. *Chemical Engineering Science* 3(2), 65–73.
- Rintoul, M. et S. Torquato (1996). Computer simulations of dense hard-sphere systems. *The Journal of chemical physics* 105(20), 9258–9265.
- Roux, J., F. Chevoir, et F. Toussaint (2007). Etats de compacité maximale pour les mélanges binaires de grains sphériques : étude par simulation numérique. *Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées* (268-269), 141–152.
- Roux, J.-N., S. Emam, M. Sharifipour, et C. Dano (2007). Géométrie et propriétés élastiques des matériaux granulaires. *18ème Congrès Français de Mécanique (Grenoble 2007)*.
- Sangani, A. S., A. Acrivos, et P. Peyla (2011). Roles of particle-wall and particle-particle interactions in highly confined suspensions of spherical particles being sheared at low reynolds numbers. *Physics of Fluids* 23, 083302.
- Scher, H. et R. Zallen (1970). Critical density in percolation processes. *The Journal of Chemical Physics* 53(9), 3759–3761.
- Scott, G. (1960). Packing of spheres : packing of equal spheres. *Nature* 188(4754), 908–909.
- Scott, G. et D. Kilgour (1969). The density of random close packing of spheres. *Journal of Physics D : Applied Physics* 2, 863.
- Segré, G. et A. Silberberg (1962). Behaviour of macroscopic rigid spheres in poiseuille flow part 1. determination of local concentration by statistical analysis of particle passages through crossed light beams. *Journal of Fluid Mechanics* 14(01), 115–135.
- Seto, R., R. Mari, J. Morris, et M. Denn (2013). Discontinuous shear thickening of frictional hard-sphere suspensions. *Physical review letters* 111(21), 218301.
- Shäfer, J., S. Dippel, et D. Wolf (1996). Force schemes in simulations of granular materials. *Journal de physique I* 6(1), 5–20.
- Shapiro, A. et R. Probst (1992). Random packings of spheres and fluidity limits of monodisperse and bidisperse suspensions. *Physical review letters* 68(9), 1422–1425.
- Sharma, N. et N. Patankar (2005). A fast computation technique for the direct numerical simulation of rigid particulate flows. *Journal of Computational Physics* 205(2), 439–457.
- Sierou, A. et J. Brady (2001). Accelerated Stokesian dynamics simulations. *Journal of Fluid Mechanics* 448, 115–146.
- Sierou, A. et J. Brady (2002). Rheology and microstructure in concentrated noncolloidal suspensions. *Journal of Rheology* 46, 1031.
- Sierou, A. et J. F. Brady (2004). Shear-induced self-diffusion in non-colloidal suspensions. *Journal of Fluid Mechanics* 506, 285–314.

- Silbert, L., D. Ertas, G. Grest, T. Halsey, D. Levine, et S. Plimpton (2001). Granular flow down an inclined plane : Bagnold scaling and rheology. *Phys. Rev. E* 64(5), 051302.
- Simeonov, J. A. et J. Calantoni (2012). Modeling mechanical contact and lubrication in direct numerical simulations of colliding particles. *International Journal of Multiphase Flow*.
- Simoës, M. (2006). *Modélisation eulérienne de la phase dispersée dans les moteurs à propergol solide, avec prise en compte de la pression particulaire*. Ph. D. thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- Simoës, M., P. Della Pietra, F. Godfroy, et O. Simonin (2005). Continuum Modeling of the Dispersed Phase in Solid Rocket Motors. Dans *17 th AIAA Computational Flow Dynamics Conference ; Toronto, Ontario*, pp. 1–15.
- Singh, A. et P. Nott (2000). Normal stresses and microstructure in bounded sheared suspensions via Stokesian dynamics simulations. *Journal of Fluid Mechanics* 412, 279–301.
- Singh, A. et P. Nott (2003). Experimental measurements of the normal stresses in sheared stokesian suspensions. *Journal of Fluid Mechanics* 490, 293–320.
- Singh, P., T. Hesla, et D. Joseph (2003). Distributed Lagrange multiplier method for particulate flows with collisions. *International Journal of Multiphase Flow* 29(3), 495–509.
- Smart, J. et D. Leighton (1989). Measurement of the hydrodynamic surface roughness of noncolloidal spheres. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 1(1), 52–60.
- Sommerfeld, M., B. van Wachem, et R. Oliemans (2007). Dispersed turbulent multi-phase flow. *Best practice guidelines, ERCOFTAC*.
- Staniforth, A. et J. Côté (1991). Semi-lagrangian integration schemes for atmospheric models : A review. *Monthly Weather Review* 119(9), 2206–2223.
- Steinhardt, P., D. Nelson, et M. Ronchetti (1983). Bond-orientational order in liquids and glasses. *Physical Review B* 28(2), 784.
- Stickel, J. et R. Powell (2005). Fluid mechanics and rheology of dense suspensions. *Annual Review of Fluid Mechanics* 37, 129–149.
- Taira, K. et T. Colonius (2007). The immersed boundary method : A projection approach. *Journal of Computational Physics* 225(2), 2118–2137.
- Tanguy, S. (2004). *Développement d'une méthode Level-Set pour le suivi d'interfaces et applications*. Ph. D. thesis, Université de Rouen.
- Tannehill, J., D. Anderson, et R. Pletcher (1997). *Computational fluid mechanics and heat transfer*. Taylor & Francis Group.
- Tauzia, J. (2003). *A propos des matériaux énergétiques*. Documents internes SNPE.
- Teipel, U. et U. Förster-Barth (2011). Rheology of suspensions with aluminum nano-particles. *Journal of Aerospace Technology and Management* 1(1), p–43.
- Temam, R. (1968). Une méthode d'approximation de la solution des équations de Navier-Stokes. *Bull. Soc. Math. France* 98, 115–152.
- Torquato, S. (2002). Random heterogeneous materials : microstructure and macroscopic properties. *Applied Mechanics Reviews* 55, B62.

- Tseng, Y. et J. Ferziger (2003). A ghost-cell immersed boundary method for flow in complex geometry. *Journal of Computational Physics* 192(2), 593–623.
- Uhlmann, M. (2005). An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics* 209(2), 448–476.
- Vadas, E., H. Goldsmith, et S. Mason (1976). The microrheology of colloidal dispersions. iii. concentrated emulsions. *Transactions of the Society of Rheology* 20(3), 373–407.
- Veeramani, C., P. Mineev, et K. Nandakumar (2007). A fictitious domain formulation for flows with rigid particles : A non-Lagrange multiplier version. *Journal of Computational Physics* 224(2), 867–879.
- Verdon, N., P. Laure, A. Lefebvre-lepot, et L. Lobry (2011). Problèmes de contact pour des particules en écoulement cisailé. Dans *10ème colloque national en calcul des structures*.
- Verlet, L. (1967). Computer experiments on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. *Phys. Rev.* 159(1), 98.
- Vink, R. (2012). Lectures on Monte Carlo methods in Statistical Physics. http://www.theorie.physik.uni-goettingen.de/~vink/mc_lecture/data_11/notes2.pdf. [accessible mars 2014].
- Vinogradova, O. et G. Yakubov (2003). Dynamic effects on force measurements. 2. lubrication and the atomic force microscope. *Langmuir* 19(4), 1227–1234.
- Vinogradova, O. I. et G. E. Yakubov (2006). Surface roughness and hydrodynamic boundary conditions. *Physical Review E* 73(4), 045302.
- Volkov, I., M. Cieplak, J. Koplik, et J. R. Banavar (2002). Molecular dynamics simulations of crystallization of hard spheres. *Physical Review E* 66(6), 061401.
- Völtz, C., M. Nitschke, L. Heymann, et I. Rehberg (2002). Thixotropy in macroscopic suspensions of spheres. *Physical Review E* 65(5), 051402.
- Wachs, A. (2009). A DEM-DLM/FD method for direct numerical simulation of particulate flows : Sedimentation of polygonal isometric particles in a Newtonian fluid with collisions. *Computers & Fluids* 38(8), 1608–1628.
- Wagner, G. J., S. Ghosal, et W. K. Liu (2003). Particulate flow simulations using lubrication theory solution enrichment. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.* 56(9), 1261–1289.
- Walton, O. R. et R. L. Braun (1986). Viscosity, granular-temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks. *Journal of Rheology* 30, 949.
- Wan, D. et S. Turek (2006). Direct numerical simulation of particulate flow via multigrid FEM techniques and the fictitious boundary method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 51(5), 531–566.
- Wan, D. et S. Turek (2007). Fictitious boundary and moving mesh methods for the numerical simulation of rigid particulate flows. *Journal of Computational Physics* 222(1), 28–56.
- Wang, Q. et K. Squires (1996). Large eddy simulation of particle-laden turbulent channel flow. *Physics of Fluids* 8(5), 1207–1223.
- Wildemuth, C. et M. Williams (1984). Viscosity of suspensions modeled with a shear-dependent maximum packing fraction. *Rheologica acta* 23(6), 627–635.

- Wilson, H. (2005). An analytic form for the pair distribution function and rheology of a dilute suspension of rough spheres in plane strain flow. *Journal of Fluid Mechanics* 534(1), 97–114.
- Wilson, H. et R. Davis (2000). The viscosity of a dilute suspension of rough spheres. *Journal of Fluid Mechanics* 421, 339–367.
- Wilson, H. et R. Davis (2002). Shear stress of a monolayer of rough spheres. *Journal of Fluid Mechanics* 452, 425–441.
- Wilson, H. J. (2013). Stokes flow past three spheres. *Journal of Computational Physics* 245, 302–316.
- Wyart, M. et M. Cates (2014). Discontinuous shear thickening without inertia in dense non-brownian suspensions. *Physical review letters* 112(9), 098302.
- Yamaguchi, Y. (1994). Frottement des plastiques. *Techniques de l'ingénieur* A3138.
- Yang, B., J. Wang, D. Joseph, H. Hu, T. Pan, et R. Glowinski (2005). Migration of a sphere in tube flow. *Journal of Fluid Mechanics* 540(1), 109–131.
- Yang, J. et E. Balaras (2006). An embedded-boundary formulation for large-eddy simulation of turbulent flows interacting with moving boundaries. *Journal of Computational Physics* 215(1), 12–40.
- Yeo, K. et M. Maxey (2010a). Anomalous diffusion of wall-bounded non-colloidal suspensions in a steady shear flow. *EPL (Europhysics Letters)* 92(2), 24008.
- Yeo, K. et M. Maxey (2010b). Dynamics of concentrated suspensions of non-colloidal particles in couette flow. *Journal of Fluid Mechanics* 649(1), 205–231.
- Yeo, K. et M. Maxey (2010c). Simulation of concentrated suspensions using the force-coupling method. *Journal of Computational Physics* 229(6), 2401–2421.
- Yeo, K. et M. R. Maxey (2010d). Ordering transition of non-brownian suspensions in confined steady shear flow. *Physical Review E* 81(5), 051502.
- Yu, Z., N. Phan-Thien, Y. Fan, et R. Tanner (2002). Viscoelastic mobility problem of a system of particles. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 104(2-3), 87–124.
- Yu, Z. et X. Shao (2007). A direct-forcing fictitious domain method for particulate flows. *Journal of Computational Physics* 227(1), 292–314.
- Yu, Z., X. Shao, et A. Wachs (2006). A fictitious domain method for particulate flows with heat transfer. *Journal of Computational Physics* 217(2), 424–452.
- Yu, Z., A. Wachs, et Y. Peysson (2006). Numerical simulation of particle sedimentation in shear-thinning fluids with a fictitious domain method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 136(2-3), 126–139.
- Yurkovetsky, Y. et J. Morris (2006). Triplet correlation in sheared suspensions of brownian particles. *The Journal of chemical physics* 124, 204908.
- Zarraga, I., D. Hill, et D. Leighton Jr (2000). The characterization of the total stress of concentrated suspensions of noncolloidal spheres in newtonian fluids. *Journal of Rheology* 44, 185.
- Zarraga, I. et D. Leighton Jr (2001). Normal stress and diffusion in a dilute suspension of hard spheres undergoing simple shear. *Physics of Fluids* 13, 565.

- Zhang, X. et L. Vu-Quoc (2002). Modeling the dependence of the coefficient of restitution on the impact velocity in elasto-plastic collisions. *International journal of impact engineering* 27(3), 317–341.